

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Construção de uma testemunha de emaranhamento para
experimentos de RMN e implementação da versão
quântica do experimento de escolha retardada

Tese de Doutorado apresentada ao Programa
de Pós-Graduação do Centro Brasileiro de
Pesquisas Físicas, como parte dos requisitos
necessários à obtenção do título de Doutor em
Ciências Físicas.

Jefferson Gonçalves Filgueiras

Orientador:

Ivan dos Santos Oliveira Júnior

Co-orientador:

Roberto Silva Sarthour Júnior

Rio de Janeiro, Janeiro de 2012

Aos meus pais.

Agradecimentos

Inicialmente, gostaria de agradecer aos meus orientadores Ivan e Roberto, por esses três anos de convivência e bastante aprendizado, não apenas ligado à física. E também pela paciência, apoio, oportunidades e todas as besteiras conversadas durante esse período.

Gostaria também de agradecer a todas as pessoas com quem trabalhei junto nesse período. O pessoal aqui do laboratório de RMN no CBPF: Ruben, Xandão, Xandinho, Fatemeh e César. Também aos colaboradores externos, como o pessoal da UFABC: Lucas e Roberto Serra, que me receberam em São Paulo e por lá iniciaram dois dos trabalhos dessa tese. Da USP - São Carlos: Diogo e Dudu, que me ajudou demais com dicas e referências sobre várias técnicas de RMN. Esses dois me apresentaram um cachorro-quente sensacional na minha curta passagem por terras são-carlenses. O grupo da UFMG, que me recebeu por lá algumas vezes: Reinaldo, Thiago Maciel, Tiago Debarba, Clyffe, Fernando e André. Também tem o Marcelo, da UFF, com quem alguns trabalhos foram iniciados e espero que sejam concluídos em breve. Todas essas pessoas contribuíram para a conclusão dessa tese.

Deixo minha gratidão por todos os momentos de descontração e amizade, quase sempre com um copo de cerveja por perto, com os amigos Érico, André, Mello e Roberto. Muitas foram as conversas sobre as maiores das besteiras ou sobre uma ou outra coisa mais séria. Também tenho que mencionar aqui Isidro, Ana Carla, Tovar, Sofiane, Érico Novais, Léo, Martin, Jefferson Moraes. Denise e Ricardo, por todas as exposições das quais participei.

Também tenho que mencionar o contato com alguns professores do CBPF, como meu orientador no mestrado Marco Aurélio, Helayel, Tião, Múcio, Roditi, Evaldo e Raul, entre vários outros. Com todas essas pessoas, aprendi bastante.

Pessoas extremamente importantes também são os amigos de Bicas, como Tiago, Roque, Ivan (o Bolado), Elias, Tardin, Bruno, Danúbia, Renata, Carol Macedo, Paulo Henrique, Rodrigo, Dudu, Diego, Fabiano, Cássio, Flávio... Aos amigos dos tempos de Juiz de Fora: Carol (que me é uma irmã que não tive), Thaíse, Filipe, Elton e Emerson. Em especial, queria agradecer à Janaína, que me ofereceu estadia nesse período final de doutorado. Todos vocês fazem parte disso.

Finalmente, e mais importante, fica toda a minha gratidão aos meus pais. Por tudo que fizeram na minha vida toda para que eu pudesse chegar à conclusão de mais essa importante

etapa. Sem o exemplo e sacrifício de vocês, nunca teria conseguido nada. Também tenho que falar do meu sobrinho Miguel, que mesmo tão pequeno já me proporciona desses pequenos grandes momentos do cotidiano. Também tenho que agradecer ao meu irmão, por todo o apoio nessa caminhada.

PS: Sarthour e Mello, um dia ainda pagarei a “dívida” gigante de cervejas que tenho com vocês.

Trabalhos relacionados a esta tese

Título: Experimental implementation of a NMR entanglement witness.

Autores: J. G. Filgueiras, T. O. Maciel, R. E. Auccaise, R. O. Vianna, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira.

Quantum Information Processing **11**, 1883 (2012).

Título: Experimental analysis of complementarity principle.

Autores: R. Auccaise, R. M. Serra, J. G. Filgueiras, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira, L. C. Céleri.

Phys. Rev. A **85**, 032121 (2012).

Título: Wave-particle duality in an environment with arbitrary white noise.

Autores: J. G. Filgueiras, R. S. Sarthour, A. M. S. Souza, I. S. Oliveira, R. M. Serra, L. C. Céleri

arXiv:1208.0802v2 [quant-ph] (2012) (submetido).

Resumo:

Essa tese trata de estudos sobre algumas propriedades básicas dos sistemas quânticos, como o emaranhamento e a dualidade onda-partícula, sob a ótica dos experimentos de RMN. O primeiro estudo trata de uma análise experimental de testemunhas de emaranhamento propostas no contexto de sistemas de RMN, com os observáveis medidos diretamente nos espectros de RMN. Nesse caso, são preparados alguns estados Bell-diagonal para a análise de detecção de pseudo-emaranhamento pelas testemunhas estudadas, assim como a detecção de emaranhamento pelas testemunhas é comparada no processo de relaxação do estado $|\Phi^-\rangle$.

O segundo estudo dessa tese é relacionado à dualidade onda-partícula, através da realização experimental da recente proposta de uma versão quântica do experimento de escolha retardada de Wheeler. Essa proposta e sua comprovação experimental possuem implicações diretas para o entendimento da dualidade onda-partícula, como a utilização de um único aparato experimental para a observação dos comportamentos de onda e partícula de um sistema quântico. Uma outra implicação dessa proposta é a exclusão desses comportamentos como propriedades realistas dos sistemas quânticos, fatos que demonstramos ser válido mesmo na presença de um nível arbitrário de ruído branco.

Finalmente, são discutidas duas propostas ligadas ao processamento de informação quântica por RMN. Primeiro, uma proposta de um método geral para a preparação de estados térmicos, particularmente adequado para experimentos de RMN. A segunda proposta é ligada à simulação de uma máquina térmica de um q -bit que executa um ciclo Otto, que apresenta algumas características diferentes de uma máquina térmica de sistemas clássicos.

Abstract:

This thesis deals with some basic aspects of quantum systems, namely, entanglement and wave-particle duality, studied by NMR techniques. The first study is the experimental analysis of some entanglement witnesses proposed in the context of NMR experiments, with the observables measured directly from the NMR spectra. For this study, some Bell-diagonal states were prepared for the analysis of the detection of pseudo-entanglement using the witnesses. We also studied the evolution of the witnesses upon the relaxation, that is the NMR decoherence process, for the state $|\Phi^-\rangle$ relaxing towards equilibrium.

The second study is related to the wave-particle duality, through the NMR implementation of the recent proposal of a quantum version of Wheeler's delayed-choice experiment. This proposal and its experimental realization have some direct implications for the understanding of the wave and particle behaviors of a quantum system, such as the use of a single experimental apparatus to the observation of both characters. Another implication of that proposal is the exclusion of wave and particle behaviors of a quantum system as realistic properties, which we prove to hold even in the presence of an arbitrary level of white noise.

Finally, we discuss two proposals for NMR quantum information processing. The first one is a general method for preparation of thermal states, particularly adequate for NMR experiments. The second proposal is a simulation of a quantum heat engine of one qubit executing an Otto cycle, which presents some different properties than a classical heat engine.

Sumário

1	Introdução	21
2	Elementos do processamento da informação quântica através da RMN	33
2.1	O sistema físico de RMN	33
2.1.1	Spins isolados	34
2.1.2	Interações entre spins	35
2.1.3	O hamiltoniano de controle	37
2.1.4	Relaxação e descoerência	40
2.2	Q-bits e spins nucleares	40
2.2.1	Estados puros	40
2.2.2	Matrizes densidade e misturas estatísticas	41
2.3	Portas lógicas	43
2.3.1	Portas de um q -bit e pulsos de RF	45
2.3.2	Portas de dois q -bits	46
2.3.3	Limitações experimentais	47
2.3.4	GRAPE e outras técnicas de otimização	48
2.4	Estados pseudo-puros	50
2.4.1	Gradientes de campo	52
2.4.2	Preparação de estados	54
2.5	Medidas, análise de espectros e tomografia de estado	57
2.5.1	Base de operadores produto	57
2.5.2	Análise do sinal	58
2.5.3	Tomografia de estado	63

2.5.4	Medidas fortes e RMN	64
2.6	Breve descrição do aparato experimental	67
2.6.1	Preparação de amostras	69

I Detecção de pseudo-emaranhamento através de testemunha de emaranhamento em RMN **71**

3 Emaranhamento e sua relação com RMN **73**

3.1	Algumas propriedades básicas do emaranhamento	73
3.1.1	Critérios de separabilidade	75
3.1.2	Quantificação de emaranhamento em sistemas bipartidos	76
3.1.3	Robustez generalizada e quantificação de emaranhamento em sistemas multipartidos	77
3.2	Relação entre emaranhamento e estados pseudo-puros	79
3.2.1	Separabilidade dos estados pseudo-puros	80
3.2.2	Modelo de variáveis ocultas locais para RMN	81
3.2.3	Experimentos de RMN com pseudo-emaranhamento	83
3.3	Análogo de RMN para testes de violação de desigualdades de Bell	86
3.4	Testemunhas de emaranhamento	89
3.4.1	Otimização de testemunhas e PSD	91

4 Resultado I: implementação de uma testemunha de emaranhamento de RMN **93**

4.1	Teoria	93
4.2	Testemunhas de emaranhamento ótimas e decomponíveis em RMN	95
4.3	Experimento	96
4.4	Conclusões	102

II Versão quântica do experimento de escolha retardada de Wheeler **105**

5 Experimentos de escolha retardada de Wheeler **107**

5.1	Princípio de Complementaridade	108
-----	--	-----

5.1.1	Interferômetro de Mach-Zehnder	109
5.2	O experimento de escolha retardada de Wheeler	111
5.2.1	Realização experimental	112
5.3	Versão quântica do experimento de escolha retardada	114
5.3.1	Realização experimental via ótica quântica	117
6	Resultados II: realização, via RMN, da versão quântica do experimento de escolha retardada	125
6.1	Realização experimental da versão quântica do experimento de escolha retardada	125
6.2	Dualidade onda-partícula em um ambiente com ruído branco arbitrário	129
6.3	Conclusões	136
III	Outros estudos	139
7	Preparação de estados térmicos via RMN e simulação quântica de uma máquina térmica de um q-bit	141
7.1	Preparação de estados térmicos via RMN	141
7.1.1	Sistemas homonucleares	144
7.1.2	Alguns resultados preliminares	145
7.1.3	Conclusões preliminares	146
7.2	Simulação quântica de uma máquina térmica de um q -bit	147
7.2.1	Proposta de simulação quântica via RMN.	150
7.2.2	Conclusões preliminares	154
8	Conclusão e perspectivas futuras	155

Lista de Figuras

1.1	Direção de detecção dos observáveis de Alice e Bob.	24
1.2	(a) Esquema do aparato experimental para um experimento de interferência com elétrons. Em (b), temos as estatísticas nos detectores no caso em que apenas uma das fendas está aberta. Finalmente, em (c) temos o padrão de interferência observado nos detectores no caso em que as duas fendas estão abertas. P_1 é a distribuição de probabilidades com apenas a fenda superior aberta, enquanto P_2 é a distribuição de probabilidades com a fenda inferior aberta. P_{12} é a distribuição de probabilidades observada com as duas fendas abertas. Retirado de [11].	25
1.3	(a) Esquema do aparato experimental para um experimento com elétrons em que a informação sobre qual fenda o elétron passou é obtida. Em (b), temos as estatísticas nos detectores no caso em que apenas uma das fendas está aberta. Finalmente, em (c) temos a ausência do padrão de interferência observado nos detectores no caso em que as duas fendas estão abertas, mas o caminho pelo qual o elétron passou é observado pela luz espalhada na lâmpada. P'_1 é a distribuição de probabilidades com apenas a fenda superior aberta, enquanto P'_2 é a distribuição de probabilidades com a fenda inferior aberta. P'_{12} é a distribuição de probabilidades observada com as duas fendas abertas. Retirado de [11].	26
1.4	Acima, uma visão esquemática da proposta original de Wheeler para o experimento de escolha retardada. Na parte de detecção, temos à esquerda a placa para a detecção de padrões de interferência, enquanto à direita temos os fotodetectores, que revelam o comportamento de partícula dos fótons. No detalhe, a proposta de Wheeler para o dispositivo de controle que remove ou não a placa detectora, assim permitindo a observação dos dois comportamentos, sujeitos à escolha do experimentador após a passagem do foto pela fenda dupla. Retirado de [13].	27

1.5	Esfera de Bloch. O estado $ \psi\rangle$, dado pelo vetor centrado na origem da esfera, é descrito pelos ângulos θ e φ , além do raio. Nos pólos norte e sul da esfera estão os estados da base computacional, enquanto os autoestados de momento angular nas direções x e y estão ao longo desses eixos.	29
2.1	Esfera de Bloch. O estado $ \psi\rangle$, dado pelo vetor centrado na origem da esfera, precessa na direção do campo magnético \vec{B}_0 , a direção z	35
2.2	Espectro de ^{13}C da molécula de tricloroetileno, que tem sua fórmula estrutural mostrada na Figura da direita.	37
2.3	Nutação de um spin sujeito a um campo de RF. (a) no referencial girante. (b) no referencial do laboratório.	39
2.4	Esquema de uma amostra de RMN e linhas de campo em uma região com gradiente.	53
2.5	Espectros dos operadores da base de espectros. (a) Os oito espectros dos operadores da base de espectros, de um spin i . Cada um desses espectros é obtido de um operador densidade igual a cada um desses operadores. A presença do operador I_{jz} faz com que as linhas associadas à interação do spins que tenha J_{ij} tenham sinais opostos. (b) Nesse exemplo, J_{12} é o acoplamento mais fraco e J_{13} o forte. (c) Exemplo da descrição de um espectro como uma combinação linear dos espectros básicos. Originalmente em [77].	62
2.6	Regra para o mapeamento dos operadores produto na base de espectros. Originalmente em [77].	63
2.7	Conjuntos de pulsos de leitura para a tomografia de estado em sistemas de 1 a 4 spins. Originalmente em [77].	64
2.8	(a) Tomografia do estado $ GHZ\rangle$. (b) Tomografia do estado após uma medida forte na direção z , dado na Eq. (2.59). (c) Tomografia do estado após uma medida forte na direção x , dado na Eq. (2.60). Original em [82].	66
2.9	Esquema mostrando os elementos essenciais de um espectrômetro de RMN, adequado para trabalhar conjuntamente com a transformada de Fourier implementada no computador. Abreviações: RF é a radiofrequência, e AF a frequência de áudio.	68
2.10	Fórmula estrutural da molécula de clorofórmio.	70

- 3.1 Uma mistura estatística ótima de um estado ρ com um estado separável σ , de forma que o estado resultante seja separável. O conjunto S é o conjunto dos estados separáveis, e T é o conjunto de todos os estados possíveis. O parâmetro ótimo de mistura, $s = 1/(1 + RE(\rho))$, é diretamente relacionado à robustez de emaranhamento. Original em [95]. 78
- 3.2 (a) Circuito quântico para o protocolo de teleporte quântico. Os q -bits são inicializados no estado $|\psi\rangle \otimes |00\rangle$, com $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. (b) Circuito com as operações realizadas para a implementação do teleporte via RMN. Retirado de [36]. 85
- 3.3 Circuito quântico para o protocolo de codificação superdensa. Na primeira parte do circuito, o estado de entrada $|00\rangle$ é transformado no estado do gato, $|\Phi^+\rangle$. Após, o operador de "mensagem" é aplicado, levando $|\Phi^+\rangle$ em um dos quatro estados da base de Bell. A parte final do circuito indica a medida na base de Bell. 85
- 3.4 Circuito para o cálculo da função de correlação dada por (3.23). Retirado e adaptado de [8]. 87
- 3.5 Resultados experimentais para o estado $|\phi^+\rangle$. \blacktriangledown indicam os resultados de RMN, enquanto \blacksquare indicam os resultados de ótica em [113]. A linha sólida é a previsão da mecânica quântica. Retirado de [8]. 88
- 3.6 Resultados experimentais para os estados $|\phi^+\rangle$ (\blacktriangledown) e $|\psi^-\rangle$ (\blacksquare). A linha sólida é a previsão do modelo de variáveis ocultas de Menicuci e Caves. Retirado de [8]. 89
- 3.7 Interpretação geométrica das testemunhas de emaranhamento EW e EW_{ot} , que é uma otimização de EW 90
- 3.8 Porcentagem de resultados errados com o tamanho da amostragem (N), para sistemas $2 \otimes 2$ (linha pontilhada) e $2 \otimes 3$ (linha sólida). Original em [94]. 92
- 4.1 Circuito quântico para a codificação superdensa. Na primeira parte do circuito, o estado de entrada $|00\rangle$ é transformado no estado do gato, $|\phi^+\rangle$. Após, o operador de "mensagem" é aplicado, levando $|\phi^+\rangle$ em um dos quatro estados da base de Bell. A parte final do circuito indica a medida na base de Bell. 94
- 4.2 No lado direito é mostrada a geometria dos estados Bell-diagonal, em que o octaedro no interior é a região dos estados separáveis, com os estados emaranhados fora desse octaedro. No lado esquerdo, os estados Bell-diagonal emaranhados e detectados por F estão no volume sombreado. O espaço vazio na Figura representa os estados Bell-diagonal tais que $F \geq 0$, ou seja, os estados emaranhados não detectados por F e os estados separáveis. A Figura no lado direito é retirada de [120]. 97

- 4.3 Os espectros de RMN usados na medição das funções de correlação $\langle X_I \otimes X_S \rangle$ e $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle$ para cada um dos estados preparados. O espectro de 1H está no lado esquerdo, enquanto os de ^{13}C estão à direita. (i) espectros de RMN para o estado $|\phi^-\rangle$. Para ilustrarmos a medição das funções de correlação, $\langle X_I \otimes X_S \rangle$ é medida pela diferença entre as intensidades normalizadas das linhas 1 e 2 no lado esquerdo. (ii) espectros de RMN para a identidade. (iii) espectros observados no estado emaranhado não detectado por F 98
- 4.4 Tomografia de estado dos três estados. As partes reais são multiplicadas por um fator de 4 a fim de tornar os erros experimentais mais claros, e as partes imaginárias são da mesma ordem das flutuações nas partes reais das matrizes tomografadas em todos os casos. (i) tomografia do estado $|\phi^-\rangle$. (ii) tomografia de estado da identidade, o estado separável. (iii) o estado Bell-diagonal emaranhado e não detectado por F 99
- 4.5 Sequência de pulsos empregada na preparação do estado emaranhado não detectado por F . A primeira parte, (A), é a passagem do estado de equilíbrio térmico para o estado pseudo-puro $|00\rangle$, após, o pulso modulado usando o GRAPE (B), a porta pseudo-EPR (C), o pulso de leitura e a medição. Essa é a sequência para a medição no núcleo de ^{13}C . Para a medição no 1H , a sequência de pulsos é a mesma, mas com as linhas correspondentes a cada núcleo trocadas. Acima cada retângulo indica um pulso de radiofrequência. A fase de cada pulso está acima dos retângulos, enquanto o ângulo de rotação está abaixo. 100
- 4.6 Detecção de emaranhamento por F e pela robustez generalizada na relaxação do estado $|\phi^-\rangle$. A Figura mostra explicitamente que existem estados que são emaranhados mas que não são detectados por F não apenas para estados Bell-diagonais, já que a descoerência de $|\phi^-\rangle$ leva a estados fora da classe dos estados Bell diagonais. Essa região é localizada entre os tempos próximos a 0.3s e 0.4s. Nas Figuras, τ_R e τ_W são os tempos característicos das curvas de detecção de emaranhamento pela robustez generalizada e por F , respectivamente. O tempo τ_C é o tempo aproximado que indica o fim da detecção de emaranhamento por F 101
- 4.7 Detecção de emaranhamento por F e W na relaxação. As duas testemunhas detectam emaranhamento na mesma região, mas W quantifica o emaranhamento melhor que F 102
- 5.1 Interferômetro de Mach-Zehnder. 110
- 5.2 Proposta de experimento de escolha retardada utilizando um interferômetro de Mach-Zehnder. Retirado de [13]. 112
- 5.3 Realização experimental do experimento de Wheeler. Retirado de [14] 113

5.4	Resultados do experimento de escolha retardada. Retirado de [14]	114
5.5	Representação em circuitos quânticos dos experimentos de escolha retardada de Wheeler (a) e sua versão quântica (b). Retirado e adaptado de [24].	115
5.6	Transição suave entre os comportamentos de onda e partícula. Retirado de [24].	116
5.7	Esquema da montagem experimental para o experimento de escolha retardada com controle quântico. Acima, o esquema de montagem do interferômetro, com as lâminas de “onda” e “partícula”. No detalhe, o esquema de montagem dessas lâminas. Retirado de [29].	117
5.8	Probabilidades de se observar o fóton no detector do caminho 1. De a a h , o ângulo α varia de $j\pi/8$, com j variando de 0 a 7. Os símbolos vermelhos são os pontos experimentais para a mistura estatística entre os estados de onda e partícula, enquanto os azuis são relacionados à superposição entre esses comportamentos. As linhas representam as curvas esperadas teoricamente. Retirado de [29].	118
5.9	Esquema em circuito do dispositivo fotônico integrado usado no experimento. Retirado de [30].	119
5.10	Resultados experimentais (a), os pontos brancos são os pontos experimentais, para a transição entre os comportamentos de onda e partícula, comparados com os resultados esperados teoricamente (b). Em (c) e (d), a comparação entre os resultados experimentais (pontos amarelos em (c)) e teóricos (d) para o teste de violação de desigualdade de Bell, com a violação na região em azul nos gráficos. Retirado e adaptado de [30].	120
5.11	Esquema da montagem experimental para a realização do experimento de escolha retardada. No lado esquerdo, o aparato para o fóton auxiliar c , enquanto à direita é mostrado o aparato para o fóton de teste t . Retirado e adaptado de [31].	121
5.12	Resultados experimentais. Os pontos pretos são os pontos experimentais, com suas respectivas barras de erros. A superfície sólida é a previsão teórica, com a região vermelha indicando a região em que ocorre a violação de desigualdade de Bell. Em (a), a curva para a detecção do fóton c realizada na base $\{H, V\}$, enquanto em (b) é mostrada a curva para a detecção de c na base $\{D, A\}$. Retirado e adaptado de [31].	122
6.1	Interferômetro de Mach-Zehnder com BS_2 em superposição de estar ausente e presente. Retirado e adaptado de [27].	126

- 6.2 Esquema para a sequência de operações realizadas no experimento de escolha retardada. No primeiro bloco (a), o estado inicial é preparado e a superposição do estado de S é criada. No segundo bloco (b), temos a sequência de operações para a implementação da porta Hadamard controlada. O último bloco (c) é a medida forte não seletiva feita sobre o q -bit auxiliar. Retirado e adaptado de [27]. 127
- 6.3 Probabilidade de se detectar o estado inicial, $Tr(\Delta\rho|10\rangle_{A,S}\langle 10|)$. Os pontos representam os pontos experimentais e as linhas são as curvas esperadas teoricamente. Retirado e adaptado de [27]. 129
- 7.1 Valores esperados de $\langle I_x^1 I_x^2 \rangle$ e $\langle I_z^1 I_z^2 \rangle$ em função de $1/\beta$. Em azul os pontos ligados à previsão teórica, em vermelho os pontos da simulação numérica. 146
- 7.2 Comparação entre os estados obtidos com o método e o modelo teórico. No eixo vertical, $A = 1 - \mathcal{F}$, em que $\mathcal{F} = \sqrt{\sqrt{\rho'(\beta)}\rho(\beta)\sqrt{\rho'(\beta)}}$ é a fidelidade dos estados $\rho'(\beta)$, obtidos a partir do método, com os estados $\rho(\beta)$, esperados teoricamente. No eixo horizontal, o inverso de β 147
- 7.3 Evolução da pureza durante o tempo de interação entre \mathcal{S} e \mathcal{E} sob o hamiltoniano dado em (7.12). 150

Capítulo 1

Introdução

No início do século passado vários fenômenos físicos não podiam ser explicados pela física clássica. Por exemplo, a radiação de corpo negro, o efeito fotoelétrico e o aparente conflito entre a mecânica clássica e o eletromagnetismo de Maxwell. Tais problemas foram resolvidos com o desenvolvimento da mecânica quântica, no caso dos dois primeiros exemplos, e com a proposta da teoria da relatividade especial, no último. Em particular, a mecânica quântica teve grande desenvolvimento ao longo da primeira metade do século XX, com sua axiomatização, atribuída a Von Neumann, e diversos testes experimentais da teoria [1]. No entanto, a discussão mais importante sobre a descrição da natureza pela mecânica quântica ser completa ou não foi iniciada por Einstein, Podolski e Rosen, e resultou no famoso paradoxo que leva o nome desses autores [2].

Paradoxo EPR e desigualdades de Bell

O paradoxo *EPR* é relacionado ao princípio de incerteza. Dois observadores, Maria e João, preparam duas partículas com os seguintes vínculos¹: (i) os momentos são relacionados por $p_1 + p_2 = 0$ e (ii) a posição relativa entre as mesmas sempre será $x_2 - x_1 = L$, em que L é grande. Em seguida, primeiro Maria mede x_1 ou p_1 e depois João mede p_2 . Supondo que as partículas não interagem, o resultado da medida de p_2 não pode depender se é medido x_1 ou p_1 . Contudo, se Maria medir p_1 e obtiver que $p_1 = p$, automaticamente João terá que encontrar que $p_2 = -p$, já que $p_1 + p_2 = 0$. Por outro lado, se Maria medir x_1 , não pode medir p_1 e, conseqüentemente, nada pode ser dito sobre p_2 . Porém, como foi suposto que a medida de p_2 não pode depender da escolha de Maria, então João terá que encontrar $p_2 = -p$, um resultado pré-determinado independente do resultado da medida feita por Maria. No primeiro caso, a

¹na Mecânica Quântica existe a relação de incerteza $[x, p] = i\hbar$, que impede a medida simultânea da posição e do momento de uma partícula com precisão arbitrária. No entanto, como $[x_2 - x_1, p_1 + p_2] = 0$, não há impedimento das medidas simultâneas de $x_2 - x_1$ e $p_1 + p_2$

incerteza de João sobre o valor do momento de sua partícula antes da medida é subjetiva, ou seja, depende do resultado de Maria. Já no segundo caso, a incerteza de João é objetiva, ou seja, depende da relação de incerteza. Se João tivesse medido antes de Maria, não seria possível distinguir a incerteza subjetiva da objetiva. Tal contradição fez com que Einstein, Podolsky e Rosen propusessem que a Mecânica Quântica seria uma teoria incompleta.

Numa tentativa de contornar o indeterminismo intrínseco à Mecânica Quântica, foi proposto que essa teoria seria apenas uma descrição estatística de uma teoria determinística. Tal teoria seria baseada na existência de um conjunto de variáveis chamadas de “variáveis ocultas”. A razão para esse nome é que tais teorias conteriam os ingredientes necessários para explicar o indeterminismo quântico, mas esses ingredientes estariam fora do escopo da Mecânica Quântica, ou seja, estariam ocultos. Sendo λ uma variável oculta que determina o valor exato de um observável O de uma partícula, uma coleção de partículas idênticas terá associada uma distribuição de variáveis ocultas $p(\lambda)$. Assim, o valor esperado do observável O será dado pela média:

$$\langle O \rangle = \int d\lambda O(\lambda)p(\lambda). \quad (1.1)$$

Se tal descrição estivesse correta, reproduziria todos os resultados da Mecânica Quântica e não apresentaria contradição com o realismo local. A hipótese de realismo afirma que o sistema possui todas as suas propriedades físicas pré-determinadas, independente da medida a ser realizada sobre ele. Já a hipótese de localidade postula que as medições feitas por um observador não podem influenciar as medições feitas por outro, se os dois estiverem tão distantes que nenhuma troca de informação possa ser feita entre eles. Essas duas hipóteses, juntas, formam o realismo local.

Um passo decisivo no entendimento do paradoxo *EPR* foi dado em 1964, por J. S. Bell, ao mostrar a incompatibilidade da mecânica quântica com o realismo local proposto por Einstein [3]. Mais tarde, nos anos 70 e 80, começaram-se os testes experimentais da hipótese de realismo local de Einstein a partir das chamadas desigualdades CHSH [4–7], que incluíram as imperfeições experimentais nos testes de realismo local propostos por Bell.

Imaginemos o seguinte experimento: um estado de duas partículas é preparado e cada uma delas é enviada a um observador, Maria e João. Maria recebe a partícula A e João a partícula B . Cada observador possui dois aparatos experimentais para medir propriedades físicas dessas partículas, A_1 e A_2 com Maria e B_1 e B_2 com João. A escolha dos aparatos usados para medir será feita independentemente por cada observador e as medidas serão realizadas simultaneamente para garantir que as medidas feitas por Maria não influenciarão as feitas por João, e vice-versa. Por simplicidade, suponha que cada uma das medições possa resultar em $+1$ ou -1 . Então, numa teoria de variáveis ocultas, o valor esperado quando Maria mede usando

o aparato A_i e João o aparato B_j é dado por:

$$E(A_i B_j) = \int d\lambda p(\lambda, a, b) a(\lambda, i) b(\lambda, j), \quad (1.2)$$

em que $p(\lambda, a, b)$ é a distribuição de probabilidades do sistema estar em um estado tal que $a(\lambda, i)$ seja resultado da medida de A_i e $b(\lambda, j)$ seja resultado da medida de B_j . O operador de Bell é definido como

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{B} \rangle &= E(A_1 B_1) + E(A_1 B_2) + E(A_2 B_1) - E(A_2 B_2) \\ &= \int d\lambda p(\lambda, a, b) a(\lambda, 1) b(\lambda, 1) + \int d\lambda p(\lambda, a, b) a(\lambda, 1) b(\lambda, 2) + \\ &+ \int d\lambda p(\lambda, a, b) a(\lambda, 2) b(\lambda, 1) - \int d\lambda p(\lambda, a, b) a(\lambda, 2) b(\lambda, 2). \end{aligned} \quad (1.3)$$

Da linearidade das integrais na última equação, obtemos a seguinte relação entre as distribuições de probabilidades:

$$a(\lambda, 1)[b(\lambda, 1) + b(\lambda, 2)] + a(\lambda, 2)[b(\lambda, 1) - b(\lambda, 2)] = \pm 2,$$

já que $a(\lambda, 1)[b(\lambda, 1) + b(\lambda, 2)] = 0$ e $a(\lambda, 2)[b(\lambda, 1) - b(\lambda, 2)] = \pm 2$, devido à dicotomia de $a(\lambda, i)$ e $b(\lambda, j)$ entre os valores $+1$ e -1 . Substituindo esse resultado em (1.3), temos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{B} \rangle &= E(A_1 B_1) + E(A_1 B_2) + E(A_2 B_1) - E(A_2 B_2) \\ &= E(A_1 B_1 + A_1 B_2 + A_2 B_1 - A_2 B_2) \\ &= \int d\lambda p(\lambda, a, b) [a(\lambda, 1)[b(\lambda, 1) + b(\lambda, 2)] + a(\lambda, 2)[b(\lambda, 1) - b(\lambda, 2)] \\ &\leq 2. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Essa expressão é conhecida como desigualdade de Clauser-Horne-Shimony-Holt (*CHSH*), devido aos seus quatro criadores [4].

Por outro lado, se as duas partículas compartilharem o estado quântico emaranhado $|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$. E o conjunto de observáveis dado pelo operadores $A_1 = \sigma_z$ e $A_2 = \sigma_x$, com σ_i sendo uma matriz de Pauli (veja a Seção 2.1, adiante), além dos observáveis B_j , dados pelos operadores $B_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sigma_z - \sigma_x)$ e $B_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_z - \sigma_x)$, que representam componentes de spin nas direções indicadas pelos vetores vermelhos na Fig. 1.1. Nesse caso, a mecânica quântica fornece os seguintes valores esperados: $\langle A_1 B_1 \rangle = \langle A_1 B_2 \rangle = \langle A_2 B_1 \rangle = -\langle A_2 B_2 \rangle = 1/\sqrt{2}$. Substituindo esses valores na desigualdade *CHSH*, dada em (1.3), temos como resultado $2\sqrt{2}$, ou seja, a mecânica quântica viola a desigualdade *CHSH*. Isso significa que a mecânica quântica não satisfaz à hipótese de realismo local. Esse fato foi verificado experimentalmente por várias técnicas experimentais, como interferometria de neutrons [5], ótica quântica [6,7] e Ressonância

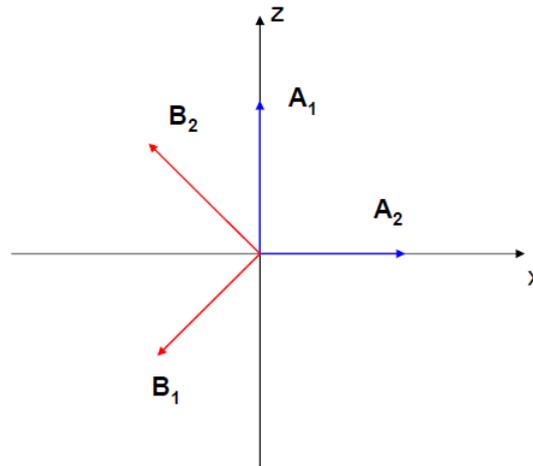


Figura 1.1: Direção de detecção dos observáveis de Maria e João.

Magnética Nuclear (*RMN*) [8].

Consequentemente, pode-se concluir da violação da desigualdade de Bell que existem correlações não-clássicas em estados emaranhados. Em outras palavras, a desigualdade de Bell nos mostra que o emaranhamento é algo fundamentalmente novo que vai além das possibilidades clássicas. A partir de 1990, foi notado que o emaranhamento pode ser utilizado como recurso para o envio de informação através de esquemas de criptografia baseados na mecânica quântica, como o protocolo BB84 [9] e o teleporte quântico [10]. Assim, o desenvolvimento de ferramentas para a detecção e quantificação de emaranhamento se fez necessária. Nesse contexto, as testemunhas de emaranhamento [19, 20] apresentam um papel importante, já que são ferramentas capazes de detectar a presença de emaranhamento em sistemas quânticos a partir da medição de observáveis do sistema.

Complementaridade e experimento de escolha retardada de Wheeler

Uma outra propriedade característica dos sistemas quânticos é a dualidade onda-partícula, que consiste na observação de sistemas quânticos se comportando como ondas, apresentando padrões de interferência, ou como partículas, situação em que uma informação sobre o caminho que o sistema quântico percorreu é obtida. No entanto, apenas um dos comportamentos é observado por vez e é associado com o aparato experimental que é utilizado no processo de medida.

Um exemplo desses dois comportamentos pode ser encontrado no experimento de fenda dupla. Se realizado com fótons ou elétrons, nesse experimento podem ser observados, em condições diferentes, tanto a aparição de franjas de interferência quanto a obtenção de informação do caminho do elétron (ou fóton). Consideremos um experimento realizado com elétrons. Para que

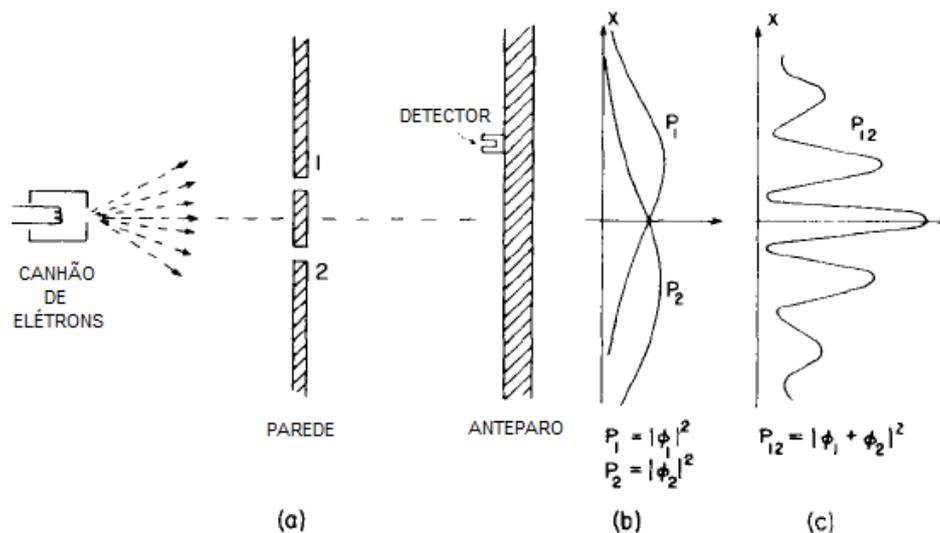


Figura 1.2: (a) Esquema do aparato experimental para um experimento de interferência com elétrons. Em (b), temos as estatísticas nos detectores no caso em que apenas uma das fendas está aberta. Finalmente, em (c) temos o padrão de interferência observado nos detectores no caso em que as duas fendas estão abertas. P_1 é a distribuição de probabilidades com apenas a fenda superior aberta, enquanto P_2 é a distribuição de probabilidades com a fenda inferior aberta. P_{12} é a distribuição de probabilidades observada com as duas fendas abertas. Retirado de [11].

se observe um padrão de interferência, os elétrons são emitidos e passam por uma placa com uma fenda dupla, cada fenda com dimensão da ordem de grandeza do comprimento de onda de de Broglie [11], e são detectadas em um detector colocado após a placa com as fendas (veja a Fig. 1.2). Nesse caso, para que o aparecimento das franjas de interferência no detector seja explicado, é necessário assumir que cada fóton passou pelas duas fendas simultaneamente.

Para que o comportamento de partícula seja observado, deve-se “olhar” os elétrons um a um. Isso pode ser feito com a colocação de uma lâmpada atrás do anteparo, situada entre as duas fendas (veja a Fig. 1.3). A lâmpada é posicionada de forma que, para cada elétron que passar pelas fendas, emita um flash que indique por qual fenda o elétron passou. Nesse caso, a estatística observada nos detectores é dada pela soma direta das distribuições de probabilidades do elétron passar por cada uma das fendas, já que o elétron sempre passa por uma ou pela outra fenda. Esse fato deve-se à luz espalhada pelo elétron perturbar o estado desse elétron, o que implica no padrão de interferência ser anulado. Assim, no caso que se obteve informação sobre o caminho percorrido pelos elétrons, não há a observação de padrões de interferência nos detectores. Diminuindo a frequência da luz (ou seja, diminuindo a energia emitida em cada flash) o que ocorre é que, quando o comprimento de onda da luz fica muito maior que a separação entre as fendas, os flashes não mais fornecem informação sobre o caminho percorrido pelos elétrons, já que a luz emitida fica um borrão maior que a separação entre as fendas.

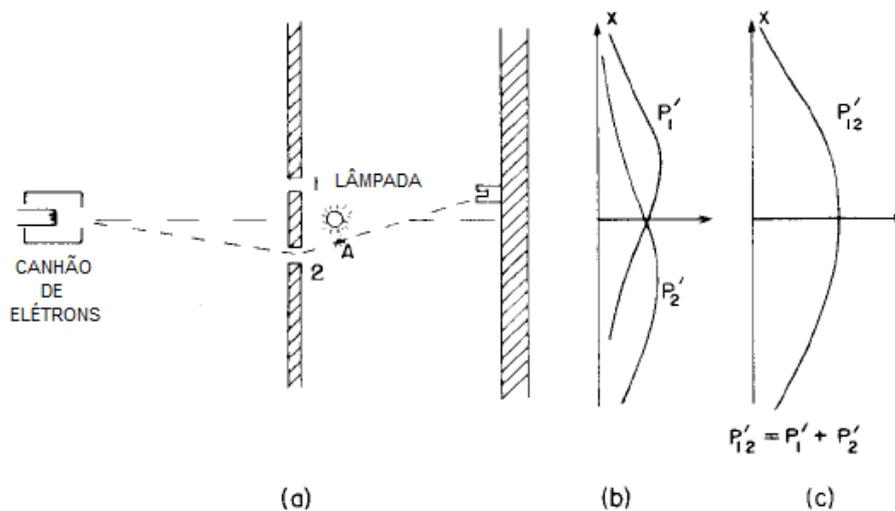


Figura 1.3: (a) Esquema do aparato experimental para um experimento com elétrons em que a informação sobre qual fenda o elétron passou é obtida. Em (b), temos as estatísticas nos detectores no caso em que apenas uma das fendas está aberta. Finalmente, em (c) temos a ausência do padrão de interferência observado nos detectores no caso em que as duas fendas estão abertas, mas o caminho pelo qual o elétron passou é observado pela luz espalhada na lâmpada. P'_1 é a distribuição de probabilidades com apenas a fenda superior aberta, enquanto P'_2 é a distribuição de probabilidades com a fenda inferior aberta. P'_{12} é a distribuição de probabilidades observada com as duas fendas abertas. Retirado de [11].

Nesse caso, a perturbação provocada pela luz sobre os elétrons é tão pequena que um padrão de interferência volta a ser observado.

Nesse experimento, é impossível se observar os dois comportamentos dos elétrons simultaneamente, a partir de uma escolha apropriada do comprimento de onda da luz espalhada pelos elétrons de forma que se obtenha a informação sobre o caminho percorrido pelos elétrons sem perturbar os elétrons de forma que o padrão de interferência seja destruído. Tal fato levou Bohr a enunciar o seu princípio de complementaridade, que diz que os comportamentos de onda e partícula são complementares e que a observação de tais comportamentos é obtida a partir de aparatos experimentais diferentes [11, 12]. Segundo Bohr, um único aparato experimental seria incapaz de observar os dois comportamentos, de onda ou partícula. Basicamente, a observação do comportamento ondulatório ou de partícula passou a ser uma escolha, feita pelo experimentador. Tal princípio também levou a questionamentos sobre a completeza da mecânica quântica na descrição da dualidade onda-partícula [122], de forma que a possibilidade de existência de variáveis ocultas, relativas ao realismo desses dois comportamentos, foi levantada já que a complementaridade dos aparatos afasta uma possível coexistência dos dois comportamentos, o que permite uma visão realista, ou seja, a qualquer momento, o elétron seria uma onda ou uma partícula.

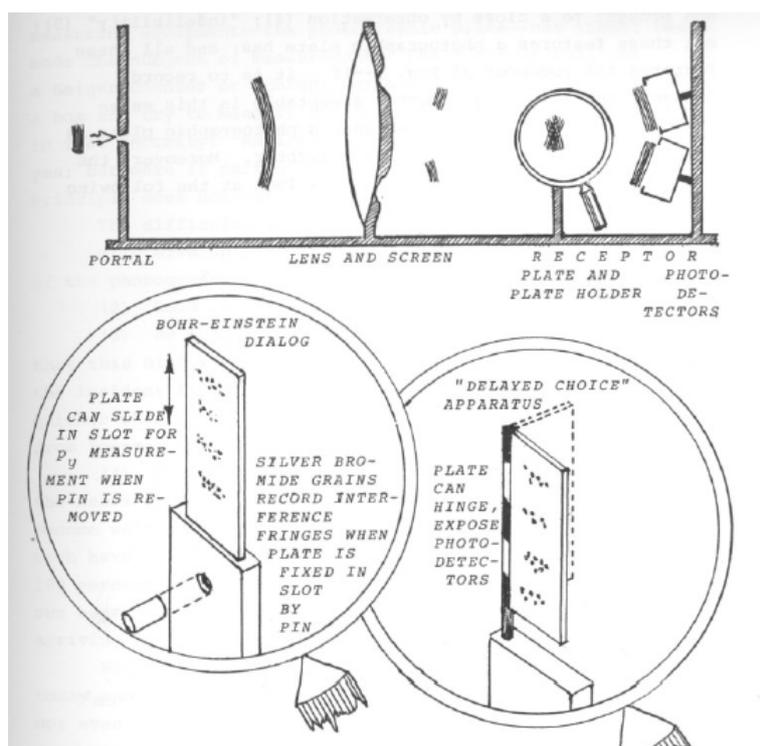


Figura 1.4: Acima, uma visão esquemática da proposta original de Wheeler para o experimento de escolha retardada. Na parte de detecção, temos à esquerda a placa para a detecção de padrões de interferência, enquanto à direita temos os foto-detectores, que revelam o comportamento de partícula dos fótons. No detalhe, a proposta de Wheeler para o dispositivo de controle que remove ou não a placa detecedora, assim permitindo a observação dos dois comportamentos, sujeitos à escolha do experimentador após a passagem do foto pela fenda dupla. Retirado de [13].

A fim de eliminar tal possibilidade, Wheeler propôs o seu famoso *gedanken experiment* de escolha retardada [13]. Em um experimento de fenda dupla realizado com fótons, os comportamentos de onda ou partícula podem ser observados por meio de uma escolha de detectores a diferentes distâncias da fenda dupla. O comportamento ondulatório é observado se uma placa detectora é colocada na posição mais próxima indicada na Fig. 1.4, enquanto a informação de caminho é obtida colocando-se os foto-detectores na posição mais distante indicada na Fig. 1.4. A ideia principal de Wheeler foi a remoção ou não da placa detectora, a partir de uma escolha do experimentador, após a passagem do fóton pelas fendas. Assim, se a placa estiver presente, observa-se um padrão de interferência na placa, e deve-se assumir que o fóton passou por ambas as fendas. Caso contrário, uma estatística característica de partículas será observada nos foto-detectores, e deve-se assumir que o fóton passou por apenas uma das fendas. Com a proposta desse experimento, pode-se remover a relação causal entre uma possível mudança do comportamento do fóton com a escolha do experimentador de se colocar ou não a placa detectora. Essa proposta de experimento foi realizada experimentalmente em um interferômetro de Mach-Zehnder [14], com a escolha de se mudar o aparato experimental feita de forma aleatória.

Computação quântica, informação quântica e testes experimentais

Com o desenvolvimento das áreas de informação e computação quânticas, que consistem no uso dos princípios da mecânica quântica para o processamento e transmissão de informação, assim como em tarefas computacionais, vários conceitos e princípios da teoria tem sido sistematicamente revisitados. Esse fato deve-se à possibilidade de utilização de dispositivos quânticos, desenvolvidos a partir do aprimoramento das técnicas de controle de sistemas quânticos. As áreas de informação e computação quânticas tem início com a possibilidade de se usar sistemas quânticos para o processamento de informação, fato demonstrado por Paul Benioff [15]. Além disso, sistemas quânticos podem ser utilizados para a simulação de outros sistemas quânticos de forma mais eficiente que em computadores clássicos, como apontado por Feynmann [16]. Tanto o trabalho de Benioff quanto o de Feynmann datam de 1982. A primeira proposta de algoritmo quântico é devida a David Deutsch, em 1985 [17]. Em 1995, Peter Shor propôs um algoritmo quântico para fatoração em números primos, problema computacionalmente difícil e que um computador clássico não consegue resolver de forma eficiente [18]. Tal fato fez com que as áreas de informação e computação quânticas passassem a atrair grande interesse da comunidade de física. A partir daí começa-se também a busca pela construção de um computador quântico. Junto a esse fato, começam a surgir as dificuldades ligadas à implementação de tais algoritmos, devido à dificuldade no controle de sistemas quânticos de larga escala.

A unidade básica de informação quântica é o q -bit (bit quântico), que é um sistema quântico de dois níveis. Cada nível de energia do sistema é associado a um estado lógico do sistema. Normalmente, se associa o estado fundamental do sistema quântico usado como q -bit com o

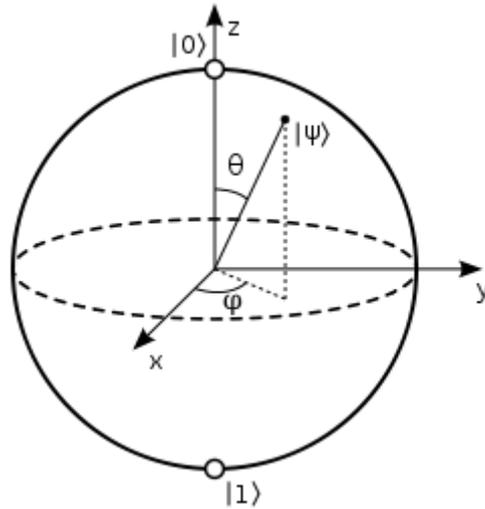


Figura 1.5: Esfera de Bloch. O estado $|\psi\rangle$, dado pelo vetor centrado na origem da esfera, é descrito pelos ângulos θ e φ , além do raio. Nos pólos norte e sul da esfera estão os estados da base computacional, enquanto os autoestados de momento angular nas direções x e y estão ao longo desses eixos.

estado $|0\rangle$ e o estado excitado com o estado $|1\rangle$, que são os estados da base computacional. Os estados de um q -bit, puros ou não, podem ser representados geometricamente em uma esfera de Bloch, com o raio do vetor indicando a pureza do estado e os ângulos φ e θ determinando as coerências e projeções do estados nos eixos coordenados, que representam os autoestados dos operadores de momento angular nas direções x , y e z . Por definição, os estados da base computacional são os autoestados da componente z de momento angular, ficando situados nos pólos norte e sul da esfera de Bloch, respectivamente. A representação do estado de um q -bit na esfera de Bloch é mostrada na Fig. 1.5. A principal diferença entre um computador clássico e um computador quântico é a possibilidade de os q -bits, poderem apresentar não apenas os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, como os bits clássicos, mas a possibilidade de serem manipulados em qualquer superposição desses dois estados, que apresenta a forma geral $\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$.

Essa possibilidade de se usar superposições de estados traz à tona o uso de estados emaranhados em tarefas de computação quântica, o que é apontado como um dos principais recursos para o ganho de poder de processamento dos computadores quânticos com relação aos clássicos. Basicamente, o emaranhamento deixou de ser visto apenas como uma propriedade fundamental dos sistemas quânticos, passando a ser um dos principais recursos computacionais na computação quântica. Por exemplo, o emaranhamento é apontado como o recurso principal no algoritmo de Shor e no protocolo de teleporte quântico. Essa “mudança de papel” fez com que várias ferramentas para a detecção e quantificação de emaranhamento fossem desenvolvidas em sistemas quânticos, como as testemunhas de emaranhamento e os mapas quânticos [19, 20], fossem propostas e investigadas.

Em conjunto com o desenvolvimento teórico da computação quântica, ocorreram os primeiros testes de protocolos e algoritmos quânticos. A primeira demonstração experimental ligada à computação quântica ocorreu com uma montagem de armadilha de íons, com a implementação da porta lógica quântica C-NOT [21]. No entanto, a técnica que despontou como principal ferramenta para os testes de algoritmos quânticos foi a RMN, que já possuía à época uma vasta gama de técnicas para o controle dos spins nucleares, os q -bits de RMN. Em particular, a primeira implementação experimental de um algoritmo quântico foi feita utilizando-se a técnica de RMN [22]. Apesar do sucesso inicial das implementações experimentais, logo foram observadas as dificuldades para o controle de sistemas quânticos de vários q -bits, o que levou ao desenvolvimento de novas técnicas para o controle desses sistemas e o desenvolvimento de dispositivos quânticos.

Com o avanço no controle de sistemas quânticos, novamente se observou a possibilidade e necessidade de se revisitar os conceitos mais básicos da mecânica quântica. Por exemplo, os princípios de Incerteza e de Complementaridade foram recentemente revisitados tanto teoricamente [23, 24] quanto experimentalmente [25–31]. O princípio de Incerteza associado com o desenvolvimento do conceito de medidas fracas e o princípio de Complementaridade ligado à utilização de dispositivos quânticos. Em particular, o segundo necessitou ser reformulado a partir da proposta da versão quântica do experimento de escolha retardada de Wheeler, ligada à utilização de um dispositivo de controle quântico. Nesse caso, um divisor de feixes que pode apresentar superposições de estar presente e ausente [24].

Nesta tese, serão discutidos os resultados ligados à detecção experimental de pseudo-entrelaçamento em sistemas de RMN através de testemunhas de emaranhamento [32] e a implementação experimental da proposta de experimento de escolha retardada quântico [27] em um sistema de RMN, assim como a demonstração de que o caráter quântico de tal experimento é presente mesmo em um ambiente com alto nível de ruído branco [33].

No Capítulo 2, será apresentada uma breve revisão das técnicas básicas de RMN aplicadas à computação quântica. O Capítulo 3 trata de uma revisão sobre a relação entre o emaranhamento e os estados pseudo-puros, os estados utilizados no processamento de informação quântica por RMN. No Capítulo 4 será discutido o primeiro resultado, ligado à testemunhas de emaranhamento para RMN. O Capítulo 5 trata de uma revisão sobre o princípio de complementaridade, passando pelo experimento de escolha retardada de Wheeler nas versões clássica e quântica, assim como uma discussão acerca de suas implementações experimentais via ótica quântica. O Capítulo 6 trata da discussão sobre a realização experimental desse experimento, além da demonstração de que a versão quântica do experimento de escolha retardada é robusta à presença de ruído branco. O Capítulo 7 trata de alguns resultados preliminares. O primeiro à proposta e teste experimental de um método para a preparação de estados térmicos via RMN, para sistema de N q -bits e com um hamiltoniano qualquer. Nesse Capítulo também é discu-

tida a realização de uma simulação em um computador quântico, via RMN, de um ciclo Otto realizado em uma máquina térmica composta por um único q -bit. Por fim, o Capítulo 8 trata das conclusões e perspectivas futuras dos trabalhos.

Capítulo 2

Elementos do processamento da informação quântica através da RMN

Neste Capítulo são discutidos os conceitos básicos sobre o processamento de informação quântica via Ressonância Magnética Nuclear (RMN), que é uma das principais ferramentas para a investigação experimental e desenvolvimento de métodos de controle de sistemas quânticos no contexto da informação quântica. O Capítulo começa com a discussão do sistema físico de RMN, passando a uma discussão dos conceitos fundamentais de computação quântica em conjunto com a sua implementação pelas técnicas de RMN. A descrição de tais conceitos pode ser encontrada tanto em artigos de revisão [34, 35], quanto em livros [36, 37]. Os conceitos ligados à RMN são discutidos em maior profundidade nos livros de Slichter [38], Ernst [39] e Abragam [40], entre vários outros. Os tópicos ligados à informação e computação quânticas são discutidos detalhadamente no livro de Nielsen e Chuang [41], entre outros.

2.1 O sistema físico de RMN

Começaremos por uma descrição do sistema físico de RMN, a partir da hamiltoniana do sistema e da hamiltoniana de controle. A hamiltoniana do sistema fornece os níveis de energia dos sistemas de spins nucleares em um campo magnético estático, enquanto a hamiltoniana de controle é associada à aplicação de pulsos de radiofrequência no sistema, próximo às frequências de ressonância do sistema. Nesse caso, devido à dependência temporal da hamiltoniana de controle, a descrição do sistema é feita a partir de um referencial girante.

2.1.1 Spins isolados

A evolução de um spin $1/2$ (os únicos tipos que serão considerados nessa tese) na presença de um campo magnético homogêneo \vec{B}_0 ao longo do eixo z é governada pelo hamiltoniano

$$H_0 = -\hbar\gamma B_0 I_z = -\hbar\omega_0 I_z = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

em que γ é o fator giromagnético do núcleo, $\omega_0/2\pi$ é a frequência de Larmor e I_z é o operador de momento angular na direção z . Os operadores de momento angular I_x , I_y e I_z são relacionados às bem conhecidas matrizes de Pauli:

$$\sigma_x = 2I_x, \quad \sigma_y = 2I_y, \quad \sigma_z = 2I_z, \quad (2.2)$$

em que

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

A interpretação da eq. (2.1) é a de que a energia do estado $|0\rangle$ (ou $|\uparrow\rangle$), o primeiro elemento da diagonal principal de H_0 , é menor que a energia do estado $|1\rangle$ (ou $|\downarrow\rangle$) por uma quantidade de $\hbar\omega_0$.

A evolução de um spin é governada pelo operador de evolução $U = \exp(-iH_0t/\hbar)$ e pode ser facilmente interpretada geometricamente como a precessão de um vetor de Bloch na direção do campo \vec{B}_0 . Usualmente, o eixo z é definido como o eixo de quantização do hamiltoniano, com o estado $|0\rangle$ ao longo de $+z$ e $|1\rangle$ ao longo de $-z$, como na Fig. 2.1.

Nessa tese lidaremos com amostras líquidas contendo núcleos de 1H e ^{13}C , que apresentam frequências de precessão na casa de centenas de MHz. Os valores típicos do campo estático B_0 são de $5 T$ a $15 T$. Cada espécie nuclear apresenta um fator giromagnético, o que faz com que spins de diferentes espécies possam ser quase sempre distinguidos em experimentos de RMN, já que essa diferença nos fatores giromagnéticos leva a frequências de precessão muito diferentes. Por exemplo, em campos de $11,74 T$, núcleos de 1H apresentam frequência de Larmor de $500 MHz$, enquanto a frequência de ^{13}C é da ordem de $125 MHz$. No caso de spins de uma mesma espécie nuclear (spins homonucleares), a vizinhança química desses spins em uma molécula leva a diferentes deslocamentos químicos, $\tilde{\sigma}_i$, que fazem com que esses núcleos possam ser distinguidos em alguns casos.

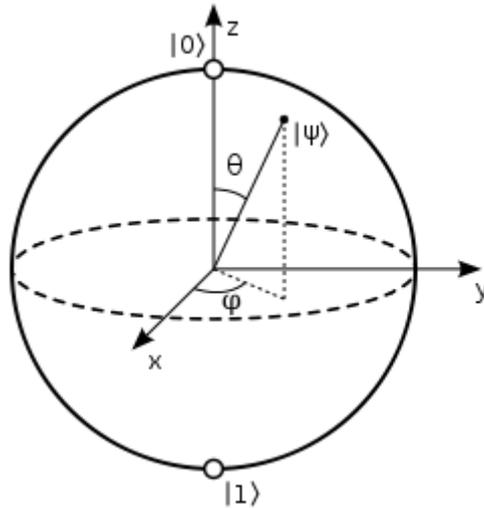


Figura 2.1: Esfera de Bloch. O estado $|\psi\rangle$, dado pelo vetor centrado na origem da esfera, executa um movimento de precessão na direção do campo magnético \vec{B}_0 , a direção z .

Assim, o hamiltoniano de uma molécula com N spins que não interagem entre si é dado por

$$H_0 = - \sum_{j=1}^N \hbar(1 - \tilde{\sigma}_j)\gamma B_0 I_z^j = - \sum_{j=1}^N \hbar\omega_0^j I_0^j, \quad (2.4)$$

nessa equação, o índice j indica o núcleo.

Os deslocamentos químicos tem origem na blindagem parcial da nuvem eletrônica que circunda o núcleo sobre os campos magnéticos externos. Como essa blindagem depende da ambiente eletrônico de cada núcleo, núcleos com ambientes eletrônicos inequivalentes apresentam deslocamentos químicos diferentes.

2.1.2 Interações entre spins

Basicamente existem dois tipos de interação entre os spins em moléculas. A interação direta entre os núcleos, ou interação dipolar, e a interação indireta mediada pelos elétrons via uma interação de contato de Fermi, conhecida como acoplamento J .

Interação dipolar

A interação magnética dipolar é semelhante à interação entre duas barras magnéticas vizinhas. Ela ocorre independente de um meio e depende do vetor \vec{r}_{ij} que liga os núcleos i e j , sendo

descrita pelo hamiltoniano

$$H_D = \sum_{i < j} \frac{\mu_0 \gamma_i \gamma_j \hbar}{4\pi |\vec{r}_{ij}|^3} \left[(\vec{I}^i, \vec{I}^j) - \frac{3}{|\vec{r}_{ij}|^2} (\vec{I}^i, \vec{r}_{ij})(\vec{I}^j, \vec{r}_{ij}) \right], \quad (2.5)$$

nessa equação, μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo e \vec{I}^i é o momento magnético do spin i . Essa expressão pode ser simplificada em diversos casos, de acordo com as condições às quais o sistema se encontra sujeito.

Para moléculas em líquidos, as interações dipolares tanto intramoleculares (entre os núcleos de uma mesma molécula) quanto intermoleculares (entre os núcleos de moléculas diferentes) anulam-se na média, devido à alta mobilidade translacional e rotacional das moléculas na amostra. Esse é o caso em que nos focaremos nessa tese.

Acoplamento J

O segundo mecanismo de interação entre os spins nucleares é o acoplamento J , ou acoplamento escalar. Essa interação é mediada pelos elétrons compartilhados nas ligações químicas entre os átomos e devido à sobreposição das funções de onda desses elétrons com os dois núcleos. Essa é uma interação do tipo de contato de Fermi. A intensidade desse acoplamento depende das espécies nucleares e decresce com o número de ligações químicas que separam os núcleos. Valores típicos de J são da ordem de algumas centenas de Hz para primeiros vizinhos e de alguns poucos Hz para núcleos separados por três ou quatro ligações. O hamiltoniano que descreve essa interação é dado por

$$H_J = \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} \vec{I}^i \cdot \vec{I}^j = \hbar \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} (I_x^i I_x^j + I_y^i I_y^j + I_z^i I_z^j), \quad (2.6)$$

em que J_{ij} é a constante de acoplamento entre os spins i e j . No caso de sistemas homonucleares em que o acoplamento J é muito menor que o deslocamento químico, ou em casos de sistemas heteronucleares, o hamiltoniano pode ser simplificado na forma

$$H_J = 2\pi \sum_{i < j} J_{ij} I_z^i I_z^j. \quad (2.7)$$

A interpretação para o termo de acoplamento escalar é de que o spin “sente” o campo magnético ao longo da direção z produzido pelo núcleo vizinho, além do campo externo \vec{B}_0 . Esse campo adicional é responsável por uma pequena mudança nos níveis de energia da molécula e permite novas transições entre os níveis de energia. Por exemplo, em um sistema de dois spins acoplados, o espectro de frequências do spin i consiste de duas linhas separadas por J_{ij}

e centrado na frequência de Larmor ω_0^i . Nesse caso, o espectro do spin i contém informação sobre o estado do spin j , $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, o que não ocorre no caso de spins desacoplados. Para cada spin adicional, o número de linhas em cada multipletto, que é ligado ao número de transições no sistema, dobra. Dessa forma, um sistema com 3 spins possui 4 linhas em cada multipletto, desde que todos os acoplamentos sejam resolvidos e linhas diferentes não se sobreponham completamente. Na Fig. 2.2 temos o exemplo do espectro de ^{13}C na molécula de tricloroetileno.

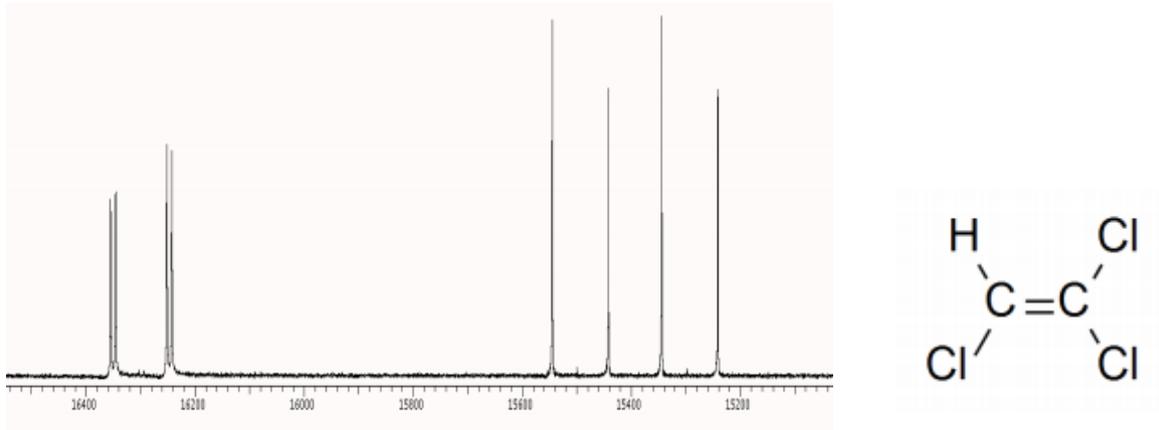


Figura 2.2: Espectro de ^{13}C da molécula de tricloroetileno, que tem sua fórmula estrutural mostrada na Figura da direita.

Embora a magnitude dos acoplamentos possa ser medida diretamente no espectro, a partir da separação entre as linhas, o sinal dos acoplamentos não é acessível diretamente nos espectros. Os sinais relativos dos acoplamentos J são determinados através de sequências de pulsos bem conhecidas, como *soft-COSY*, por exemplo [39].

Resumindo, a forma mais simples do hamiltoniano de um sistema de N spins acoplados é dada por

$$H = - \sum_{i=1}^N \hbar \omega_0^i I_z^i + \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j. \quad (2.8)$$

Esse hamiltoniano descreve bem uma vasta quantidade de sistemas de RMN usados na literatura de computação quântica, em particular a amostra que é usada nos resultados experimentais dessa tese.

2.1.3 O hamiltoniano de controle

Feita a descrição das interações dos spins nucleares com o campo magnético externo e entre si, passaremos à descrição dos mecanismos utilizados no controle do sistema de RMN. O estado de

uma partícula de spin $1/2$ pode ser manipulado pela aplicação de campos de radiofrequência, $\vec{B}_1(t)$, oscilantes no plano $x - y$ com uma frequência ω_{rf} , que é de intensidade igual ou próxima à frequência de precessão do spin. O hamiltoniano correspondente ao campo de radiofrequência (RF) é dado de forma análoga à Eq. (2.1), para a interação com o campo estático B_0 ,

$$H_{rf} = -\hbar\gamma B_1 [\cos(\omega_{rf}t + \varphi)I_x - \sin(\omega_{rf}t + \varphi)I_y], \quad (2.9)$$

em que φ é a fase do campo de RF e B_1 a amplitude. Tipicamente, temos $\omega_1 = \gamma B_1 \approx 50$ kHz , em líquidos. Para N spins, temos

$$H_{rf} = -\sum_{i=1}^N \hbar\gamma_i B_1 [\cos(\omega_{rf}t + \varphi)I_x^i - \sin(\omega_{rf}t + \varphi)I_y^i]. \quad (2.10)$$

Na prática, um campo de RF oscilante é aplicado ao longo de um eixo fixo no laboratório, perpendicular ao campo estático. Notemos ainda que a frequência, a fase e a amplitude do campo de radiofrequência podem ser variados, ao contrário de outros parâmetros como a frequência de Larmor e as constantes de acoplamento. Tal possibilidade tem papel central no controle de sistemas quânticos via RMN, com técnicas como o GRAPE¹ [54], que será discutido adiante na Seção 2.3.4.

Referencial girante

A descrição da evolução de um spin sob a ação de um campo de RF, devido à dependência temporal explícita no hamiltoniano da Eq. (2.9), é complexa se feita no sistema de coordenadas usual do laboratório (o referencial do laboratório). No entanto, essa descrição pode ser muito simplificada se feita em um sistema de coordenadas que gira com frequência ω_{rf} ao longo do eixo z (o referencial girante). Nesse sistema de coordenadas, em que o hamiltoniano do sistema é independente do tempo, o estado do sistema é descrito como [34]

$$|\psi\rangle^{rot} = \exp(-i\omega_{rf}tI_z)|\psi\rangle. \quad (2.11)$$

A substituição de $|\psi\rangle$ na equação de Schrödinger $i\hbar(d|\psi\rangle/dt) = H|\psi\rangle$ com

$$H = -\hbar\omega_0 I_z - \hbar\omega_1 [\cos(\omega_{rf}t + \varphi)I_x - \sin(\omega_{rf}t + \varphi)I_y] \quad (2.12)$$

nos dá $i\hbar(d|\psi\rangle^{rot}/dt) = H^{rot}|\psi\rangle^{rot}$, em que

$$H_{rot} = -\hbar(\omega_0 - \omega_{rf})I_z - \hbar\omega_1 [\cos(\varphi)I_x - \sin(\varphi)I_y]. \quad (2.13)$$

¹Do inglês *Gradient Ascent Pulse Engineering*.

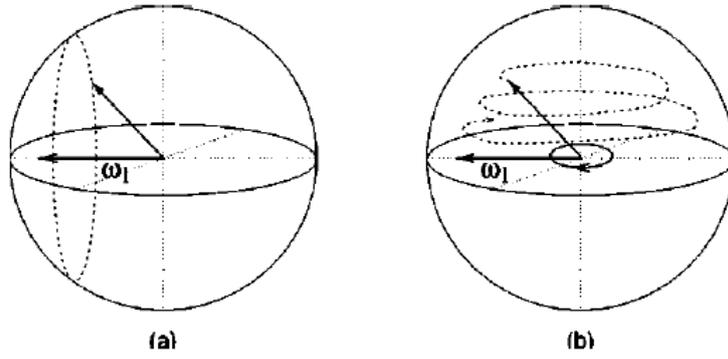


Figura 2.3: Nutação de um spin sujeito a um campo de RF. (a) no referencial girante. (b) no referencial do laboratório.

Naturalmente, o campo de RF fica ao longo de um eixo fixo no referencial girando a uma frequência ω_{rf} . Além disso, na condição de ressonância dada por $\omega_{rf} = \omega_0$, o primeiro termo da Eq. (2.13) anula-se. No referencial girante, um observador vê o spin precessando em torno do campo B_1 (veja a Fig. 2.3 (a)). A escolha da fase da radiofrequência define o eixo de nutação. Um observador no referencial do laboratório observa o spin realizando um espiral sobre a superfície da esfera de Bloch (Fig. 2.3 (b)).

Caso o campo de RF não esteja em ressonância com a frequência de Larmor por uma diferença $\Delta\omega = \omega_0 - \omega_{rf}$, o spin precessa no referencial girante ao longo de um eixo que apresenta um pequeno desvio do eixo z , de um ângulo $\alpha = \arctan(\omega_1/\Delta\omega)$, com frequência $\omega'_1 = \sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_1^2}$. Dessa forma, se o campo de RF é aplicado longe da ressonância, não há efeito sobre os spins, já que α é muito pequeno se $|\Delta\omega| \gg \omega_1$. No caso de sistemas heteronucleares, em que os spins possuem frequências de Larmor muito diferentes, pode-se girar apenas um dos spins sem afetar os demais.

Para o caso de sistemas com vários spins, utilizam-se vários referenciais girantes para cada espécie nuclear, de forma que os pulsos de RF nesse referencial girante múltiplo são dados pelo hamiltoniano

$$H_{rf}^{rot} = - \sum_{i,r} \hbar\omega_1^r [\cos((\omega_{rf}^r - \omega_0^i)t + \varphi^r)I_x - \sin((\omega_{rf}^r - \omega_0^i)t + \varphi^r)I_y], \quad (2.14)$$

em que as amplitudes ω_1^r e as fases φ^r são parâmetros de controle.

No caso de um sistema de spins acoplados, o hamiltoniano do sistema, dado pela Eq. (2.8), é simplificado de forma a ficarem apenas os termos ligados ao acoplamento J , aos deslocamentos químicos de cada núcleo e ao campo de RF.

2.1.4 Relaxação e descoerência

Uma característica importante dos spins nucleares é o seu relativamente alto isolamento do ambiente, de forma que os tempos de coerência do sistema sejam altos comparados com as escalas de tempo da dinâmica do sistema. Dessa forma, sob boa aproximação e em condições específicas, a dinâmica do sistema de RMN pode ser considerada como a de um sistema isolado.

O acoplamento do sistema com o ambiente é descrito por um hamiltoniano adicional H_{amb} , fracamente acoplado ao sistema. Esse acoplamento é o que leva à descoerência, ou perda de informação quântica. Em RMN, a descoerência é parametrizada por dois parâmetros: T_1 , ligado à perda de energia do sistema para o ambiente, e T_2 , ligado à perda de coerência do sistema.

T_2 tem origem em acoplamentos não levados em consideração no hamiltoniano do sistema ou mesmo interações que não se anulam na média, como interações dipolares tanto intramoleculares quanto intermoleculares e em termos do hamiltoniano dipolar que não contribuem para a distribuição dos níveis de energia, mas apenas para a perda de coerência do sistema. Outras fontes podem vir da anisotropia dos deslocamentos químicos e a presença de íons paramagnéticos. No entanto, tipicamente T_2 é da ordem de algumas centenas de milisegundos, chegando a tempos maiores que 1 s. Esse mecanismo de descoerência não é associado à perda de energia.

T_1 , por outro lado, se origina na interação dos spins com a rede, que são modos de excitação que podem absorver a energia na escala das frequências de Larmor do sistema. Esse processo é associado, por exemplo, com a interação dos spins com modos vibracionais da molécula ou pela presença de íons paramagnéticos. Em amostras líquidas, esses tempos usualmente são da ordem de algumas poucas dezenas de segundos. Esse mecanismo é o responsável pela termalização do sistema com a rede, sendo associado à dissipação de energia.

Obviamente, a descrição da relaxação em termos desses dois parâmetros soa um tanto quanto simplista, particularmente para sistemas de spins acoplados, nos quais mecanismos de relaxação multiparamétricos aparecem e podem ser descritos pelas equações de Redfield [38,42]. Entretanto, essa descrição mais simples é útil por capturar os principais efeitos da descoerência em computações quânticas simples via RMN [43], em que as sequências de pulsos são mais curtas que T_2 .

2.2 Q-bits e spins nucleares

2.2.1 Estados puros

Um bit quântico, ou q -bit, é simplesmente um sistema quântico de dois níveis, com seus autoestados definidos como $|0\rangle$ e $|1\rangle$ e ligados efetivamente com os estados lógicos 0 e 1. Essa base convencional é dita a base computacional. No caso de RMN, os spins $1/2$ satisfazem automaticamente essa definição, de forma que o estado $|0\rangle$ é o estado fundamental $|\uparrow\rangle$ e $|1\rangle$ o estado excitado $|\downarrow\rangle$. Como é óbvio, sistemas com N spins $1/2$ são sistemas de N q -bits.

Contrário ao caso dos bits clássicos em que apenas dois estados, 0 e 1, podem ser acessados, os bits quânticos podem estar em qualquer superposição dos estados da base computacional,

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle. \quad (2.15)$$

Apesar dessa característica, um sistema de um único q -bit não chega a ser interessante. São para sistemas com mais de um q -bit que as propriedades mais interessantes começam a surgir. Um sistema de dois q -bits, por exemplo, pode ser encontrado em uma superposição qualquer de seus quatro estados da base computacional, $|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$, com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$. Esses estados podem ser divididos em duas classes de estados, os ditos estados separáveis, que podem ser decompostos em um produto tensorial de estados individuais de cada sistema, como o estado $1/2(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) = 1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes 1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$. A segunda é a classe de estados emaranhados, que não podem ser decompostos dessa forma, como por exemplo os estados $|\phi^\pm\rangle = 1/\sqrt{2}(|00\rangle \pm |11\rangle)$ e $|\psi^\pm\rangle = 1/\sqrt{2}(|01\rangle \pm |10\rangle)$, que formam a base de Bell. O emaranhamento, relacionado à não separabilidade de estados, é apontado como um dos principais recursos que os computadores quânticos apresentam e que permitem o maior poder em termos de processamento se comparado com os computadores clássicos.

Vale comentar que, embora sistemas heteronucleares apresentem algumas vantagens, a quantidade de espécies com spin $1/2$ é bastante limitada (1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si e ^{31}P). Dessa forma, sistemas totalmente heteronucleares são obtidos na natureza apenas para um número muito baixo de q -bits. Assim, sistemas com núcleos de uma mesma espécie tem sido constantemente utilizados como amostras para o processamento de informação quântica por RMN, como o tricloroetileno (1H e dois ^{13}C) e o ácido transcrotônico (dois 1H , quatro ^{13}C e um grupo metil).

2.2.2 Matrizes densidade e misturas estatísticas

A descrição acima dos possíveis estados de um q -bit pressupõe uma preparação de estados perfeita, de forma que esses estados sejam estados puros conhecidos. No entanto, tal situação

é apenas uma idealização, devido às limitações experimentais. Uma forma de se lidar com essa situação é pela introdução de estados não puros, ou misturas estatísticas (ou estados mistos).

Para ilustrar a ideia por trás do conceito de estados mistos, podemos imaginar uma preparação de estados real como uma combinação de preparações de estados puros em conjunto com um misturador aleatório dessas preparações. Nessa situação, cada aparato de preparação emite um dado estado puro $|\psi_i\rangle$. O misturador escolhe aleatoriamente um dos estados $|\psi_i\rangle$, com uma certa probabilidade p_i , e fornece o estado ao experimentador.

Para elaborar a descrição matemática desses estados, podemos partir do resultado de que a totalidade dos valores esperados contém toda a informação sobre um sistema. Como o valor esperado de um observável A com um estado misto é a soma dos valores esperados de cada estado $|\psi_i\rangle$, cada um com uma probabilidade p_i , temos

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_\rho &= \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \\ &= \sum_{i,k} p_i \langle \psi_i | A | \beta_k \rangle \langle \beta_k | \psi_i \rangle \\ &= \sum_k \langle \beta_k | \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| A \right) | \beta_k \rangle,\end{aligned}\tag{2.16}$$

em que $|\beta_k\rangle$ é um estado de uma base do espaço de Hilbert. Da última expressão, podemos descrever o estado misto pelo operador

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|,\tag{2.17}$$

com o valor esperado dado por $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$. ρ é dito operador densidade, em analogia com densidades de probabilidade da teoria de probabilidades clássica. Como pode-se mostrar facilmente, o operador densidade é um operador hermitiano, não-negativo (já que seus autovalores são todos não-negativos (≥ 0)), e de traço unitário ($\text{Tr} \rho = 1$). Obviamente, a condição de traço unitário é associada à normalização da distribuição de probabilidades que o estado misto representa.

Uma outra propriedade importante dos estados mistos é que um estado é puro se, e só se, seu operador for idempotente, ou seja, $\rho^2 = \rho$. Para mostrar tal fato, basta notar que se $p_i = 1$ para algum i , então todas as outras são nulas. Como temos $\text{Tr} \rho^2 \leq 1$, com a igualdade apenas para os estados puros, essa propriedade é usada para quantificar o quanto um estado é “puro”. Essa propriedade é dita a pureza do estado.

Uma propriedade interessante, e sem análogo na teoria de probabilidades clássica, é que o operador densidade pode ser descrito por diferentes misturas de estados puros. Por exemplo,

ao misturarmos os seguintes estados de um q -bit $|0\rangle$, $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ e $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ com os pesos $p_0 = 0.8$, $p_+ = 0.1$ e $p_- = 0.1$, temos o operador densidade dado por

$$\begin{aligned} \rho &= 0.8 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + 0.1 \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + 0.1 \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0,9 & 0 \\ 0 & 0,1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

que é o mesmo operador densidade obtido com a mistura de $|0\rangle$ e $|1\rangle$, com pesos $p_0 = 0,9$ e $p_1 = 0,1$.

2.3 Portas lógicas

O objetivo da computação quântica é a implementação de operações lógicas sobre os q -bits de forma que o estado final seja associado à solução de algum problema computacional específico, como a fatoração em números primos [18] ou a busca em uma base de dados [44]. Dessa forma, no que tange ao controle de sistemas quânticos, o objetivo é a implementação de uma transformação unitária sobre os q -bits, U , que possa ser decomposta em uma sequência de transformações unitárias, $U = U_k U_{k-1} \dots U_2 U_1$, em que as transformações U_i são chamadas portas lógicas quânticas.

No contexto de computação clássica, uma operação qualquer sobre um conjunto de bits pode ser decomposta nas portas *AND*, *OR* e *NOT*, que é um conjunto de portas lógicas universais, assim como o conjunto minimal formado pelas portas *NAND* e *NOR*. No entanto, essas portas não possuem significado no contexto de computação quântica, devido à não reversibilidade das portas lógicas *AND* e *OR*. Diferentemente do conceito de reversibilidade da termodinâmica, reversibilidade aqui se entende como a possibilidade de se conhecer os estados iniciais de uma porta lógica a partir do estado de saída. A irreversibilidade dessas portas é devido à entrada de dois bits de informação com apenas um bit como o resultado dessas operações. Um exemplo simples de irreversibilidade de uma operação nesse sentido é a possibilidade de se escrever de infinitas maneiras diferentes um dado número como a soma de outros dois, por exemplo, $1 + 1 = 2 + 0 = 2$.

Assim, precisamos definir um conjunto de operações lógicas de tal forma que uma operação unitária qualquer possa ser decomposta em um número finito de operações lógicas “básicas”. A possibilidade dos q -bits poderem estar em um estado de superposição dificulta na obtenção desse conjunto. No entanto, é possível obter um conjunto de operações básicas que descreva uma

transformação unitária qualquer, de forma arbitrariamente precisa, por meio de um circuito que use um número pequeno dessas operações básicas [41]. Esse conjunto é dado pelas operações de um q -bit

$$\text{---}\boxed{H}\text{---} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

conhecida como porta de Hadamard (por ser uma matriz de Hadamard), que realiza as transformações

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow |+\rangle \rightarrow |0\rangle \\ |1\rangle &\rightarrow |-\rangle \rightarrow |1\rangle, \end{aligned}$$

e a raiz quarta da operação de fase (T):

$$\text{---}\boxed{T}\text{---} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

Em conjunto, essas duas operações podem ser utilizadas para produzir qualquer transformação unitária sobre um q -bit. Com a adição da porta de dois q -bits NÃO-controlada (ou $CNOT$) dada por

$$\begin{array}{c} \text{---}\bullet\text{---} \\ | \\ \text{---}\oplus\text{---} \end{array} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

qualquer transformação unitária pode ser construída de forma eficiente [41]. Essa porta inverte o q -bit alvo (representado na segunda linha do circuito na equação acima) se, e só se, o q -bit de controle (no primeiro q -bit) estiver no estado $|1\rangle$.

No caso particular de RMN, todas as portas lógicas são escritas como sequências das portas representadas pelas matrizes de Pauli σ_x e σ_y , via pulsos de RF, além da porta de fase-

controlada, dada por

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \bullet \\ \text{---} \\ \boxed{Z} \\ \text{---} \end{array} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

e que é ligada à um período de evolução livre do sistema de q -bits.

É conveniente notar aqui que diferentes portas lógicas podem ser aplicadas a um mesmo estado e ter o mesmo resultado, desde que essas portas lógicas gerem apenas uma diferença de fase global.

2.3.1 Portas de um q -bit e pulsos de RF

Dado que temos o conjunto de portas lógicas para a implementação de uma transformação unitária qualquer, o passo seguinte é conseguirmos obter cada uma dessas portas lógicas a partir dos pulsos de RF, que são rotações ao longo dos eixos x e y , que são as ferramentas da RMN. Nessa Subseção e na seguinte assumimos a capacidade de excitar cada spin isoladamente.

Os pulsos de RF, que são descritos pelo hamiltoniano de controle da Eq. (2.9), geram evoluções do tipo

$$R_\varphi(\theta) = \exp(-i\omega_1 (\cos(\varphi)I_x - \sin(\varphi)I_y) t_d), \quad (2.23)$$

em que ω_1 é ligado à potência² do pulso e t_d é a duração. $R_\varphi(\theta)$ descreve uma rotação de ângulo $\theta = \omega_1 t_d$ do spin na esfera de Bloch, no plano $x - y$ e ao longo de um eixo definido pelo ângulo φ . Assim, um pulso de fase $\varphi = \pi$ e duração $\theta = \pi/2$ é uma rotação de $\pi/2$ sobre o eixo x . Enquanto uma rotação tal que $\varphi = \pi/2$ e $\theta = \pi$ é uma rotação de π sobre o eixo y .

As rotações sobre o eixo z podem ser facilmente obtidas através de sequências³ do tipo

$$R_z(\theta) = R_x(\pi/2)R_y(\theta)R_x(\pi/2) = R_y(\pi/2)R_x(\theta)R_y(\pi/2). \quad (2.24)$$

Como a porta T é uma rotação de $\pi/4$ em z , temos $T = R_z(\pi/4)$.

²A potência é dada pelo quadrado de ω_1 .

³A sequência de pulsos é ordenada temporalmente da direita para a esquerda.

A porta Hadamard é dada pela sequência de pulsos

$$H = R_x(\pi)R_y(\pi/2). \quad (2.25)$$

Algumas vezes, a porta Hadamard pode ser trocada simplesmente por uma rotação de $\pi/2$ no eixo y ou $-y$, quando é dita pseudo-Hadamard.

2.3.2 Portas de dois q -bits

Como foi mencionado no início dessa Seção, a porta de dois q -bits básica nas implementações de RMN é a porta de fase controlada, dada pela Eq. (2.22),

$$\begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{Z} \text{---} \end{array} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Esse fato deve-se a essa porta ser ligada quase que diretamente à evolução originada pelo hamiltoniano de interação sobre o acoplamento J dos dois spins envolvidos na porta lógica. Aqui daremos uma forma válida de se obter a *CNOT* para sistemas heteronucleares de dois q -bits (para casos mais gerais, veja [34, 35]).

A ideia principal é a de que a *CNOT* pode ser obtida a partir da porta de fase controlada por meio do circuito⁴

$$\begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \text{---} \oplus \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{H} \text{---} \boxed{Z} \text{---} \boxed{H} \text{---} \end{array}$$

Expandindo a porta de fase controlada na base das matrizes de Pauli, também dita base de operadores produto, temos

$$Z - \text{controlada} = \exp \left(-i \frac{\pi}{2} \left(-\frac{1}{2} \mathbb{1} + I_z + S_z - 2I_z S_z \right) \right), \quad (2.27)$$

em que I_z é a componente z do spin 1 e S_z é a componente z do spin 2. Como todos os termos comutam, temos que a porta de fase controlada é dada por uma sequência de pulsos de $\pi/2$ na direção z em cada q -bit e de um termo ligado à uma evolução livre gerada pela interação por

⁴A ordem temporal das operações em um circuito quântico é da esquerda para a direita.

acoplamento J , por um tempo $1/2J$. Utilizando a sequência de pulsos para as rotações sobre o eixo z e a porta Hadamard, dadas nas Eqs. (2.24) e (2.25), e simplificando a sequência de pulsos temos a porta $CNOT$ por⁵

$$CNOT = \sqrt{i}R_z^1(\pi/2)R_{-z}^2(\pi/2)R_x^2(\pi/2)U_J(1/2J)R_y^2(\pi/2). \quad (2.28)$$

Nessa equação, U_J é uma evolução livre.

Uma outra classe de portas controladas particularmente importante é a das rotações controladas, que são importantes na preparação dos estados pseudo-puros (como pode ser visto na Subseção 2.4.2 adiante). Tais portas realizam uma rotação sobre o q -bit alvo se, e só se, o q -bit de controle estiver no estado $|1\rangle$. Essas portas podem ser obtidas através das sequências de pulso

$$\begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \boxed{R_\varphi(\theta)} \\ \text{---} \end{array} = R_y^2(\pi/2)R_x^2(\pi)U_J\left(\frac{\theta}{2\pi J}\right)R_x^2(\pi)R_z^1(\pi/2)R_z^2(\pi/2)R_y^2(\pi/2). \quad (2.29)$$

2.3.3 Limitações experimentais

Na Subseção anterior, foi pressuposta a capacidade de se excitar cada um dos q -bits individualmente. No entanto, essa condição não é trivialmente satisfeita para sistemas que contenham spins de uma mesma espécie nuclear, já que eles estão situados próximos uns aos outros na escala de frequência. Cada pulso de duração t_d excita normalmente uma faixa de frequências da ordem de $1/t_d$. Os pulsos retangulares, da forma dada na Eq. (2.23), usam alta potência e possuem, tipicamente, duração da ordem de uma dezena de microssegundos. Assim, tais pulsos excitam uma faixa de frequências da ordem $100kHz$. Como os deslocamentos químicos que separam os núcleos são da ordem de 1 a $10kHz$, pulsos retangulares em geral não acessam os spins de um sistema homonuclear isoladamente.

Para contornar tal problema, é necessário que a liberdade de se variar a potência e fase dos pulsos seja usada, de forma que apenas um spin seja excitado durante a aplicação do pulso. Pulsos dessa forma são ditos pulsos modulados. Por exemplo, para acessar individualmente um spin que dista de $1kHz$ de um outro spin e seu conjunto de linhas espectrais, que formam um multiplete, seja da ordem de $300Hz$, precisamos excitar apenas a região de frequências desse multiplete, o que levaria a um pulso seletivo com duração de $1/300s \approx 3ms$. Alguns pulsos modulados bastante comuns são os pulsos gaussianos [45], hermitianos [46] e BURP [47].

Apesar desses pulsos conseguirem acessar individualmente os spins homonucleares, a duração desses pulsos é da ordem dos tempos característicos da evolução dos q -bits pelo hamiltoniano

⁵Os índices sobrescritos indicam sobre qual q -bit a rotação é feita.

do sistema, já que o inverso dos acoplamentos J são da ordem de grandeza da duração dos pulsos modulados. Isso leva os spins a uma evolução diferente da evolução gerada apenas por uma rotação, devido à evolução pelos hamiltonianos de interação do sistema. Uma forma de se anular essas evoluções indesejadas é por técnicas de refocalização, que usam pulsos de π e períodos de evolução livre dos spins [48]. No entanto, a quantidade de evoluções livres e pulsos necessários nos esquemas de refocalização aumenta exponencialmente com a quantidade de spins, o que torna a técnica pouco eficiente para o processamento de informação quântica.

Um outro problema na implementação de portas lógicas em sistemas homonucleares é a imperfeição na forma dos pulsos modulados, que pode levar aos deslocamentos de Bloch-Siegert [49]. Esse efeito é devido aos pulsos modulados ainda excitarem mais de um núcleo, devido à imperfeições experimentais.

Uma forma de se lidar com todas essas dificuldades é por meio do desenvolvimento de sequências de pulsos a partir do uso de referenciais abstratos [50]. Nesses referenciais, um para cada spin do sistema, podem ser desenvolvidas sequências de pulsos por meio de transformações nesses referenciais que cancelam os efeitos indesejados. Por exemplo, as fases geradas pelos deslocamentos de Bloch-Siegert podem ser corrigidos girando-se cada um dos referenciais abstratos de forma que essas rotações absorvam essas fases. Esses referenciais abstratos também são utilizados em técnicas de desacoplamento dinâmico, que consistem em sequências de pulsos que isolam o sistema dos efeitos da interação com o ambiente, levando à memórias quânticas e portas lógicas de alta fidelidade [51–53].

Alternativamente, esses problemas podem ser tratados a partir do uso de métodos de otimização para a implementação de transformações unitárias, como o GRAPE [54] e o SMP [55]. Essas técnicas serão vistas em mais detalhes a seguir.

2.3.4 GRAPE e outras técnicas de otimização

Como discutido na última Subseção, o controle de sistemas homonucleares e de vários q -bits apresenta algumas dificuldades inerentes ao sistema de RMN. Apesar de existirem soluções para esses problemas como os esquemas de refocalização, esses demandam um número cada vez maior de operações sobre o sistema para a implementação de portas lógicas simples. No entanto, o sistema de RMN permite a implementação de uma transformação unitária *qualquer*, a partir do hamiltoniano de interação, dado na Eq. (2.8), e de controle, na Eq. (2.9). Além disso, existe a possibilidade de se modular parâmetros do sistema de controle como a amplitude, a frequência e a fase de um pulso. A partir desses fatos, alguns métodos de otimização foram desenvolvidos para a implementação de operações unitárias em sistemas de RMN de forma direta, a fim de se evitar as longas sequências de refocalização e o acúmulo de erros sistemáticos no sistema devido à imperfeições nos pulsos, à inomogeneidades do campo de RF ou ao efeito de Bloch-Siegerts.

O primeiro método nesse sentido é a implementação de unitários a partir de pulsos fortemente modulados (SMP⁶) [55], que são pulsos modulados em amplitude, fase, duração e frequência. Esses pulsos consistem do resultado de uma otimização via método simplex que leva em conta todas as interações do sistema, e fornece a transformação unitária desejada, sem a necessidade de esquemas de refocalização e levando em conta erros experimentais inerentes ao sistema. Esse método usa um pequeno número de pulsos, que cresce à medida que a complexidade do unitário desejado aumenta. Esses pulsos foram largamente usados em vários experimentos de RMN no contexto de informação quântica em estado líquido [56–59], estado sólido [60, 61] e núcleos quadrupolares [62, 63]. Esse foi o principal método de otimização utilizado até o desenvolvimento do GRAPE [54], que utiliza técnicas de controle ótimo para a otimização das transformações unitárias.

As ideias de se implementar transformações unitárias via métodos de otimização e controle, começadas com os SMP's, mostram-se atrativas devido ao número reduzido de pulsos modulados que são aplicados sobre o sistema de spins nucleares. Uma questão que surge naturalmente é se a duração dos pulsos modulados é a mínima possível e se a otimização é robusta a erros experimentais. Essas ideias são normalmente trabalhadas no campo da teoria de controle ótimo. A partir desse ponto, foi desenvolvido o método conhecido como GRAPE⁷, que permite o desenvolvimento de pulsos modulados para a implementação de uma transformação unitária qualquer a partir da adição de campos de controle ao hamiltoniano do sistema. A ideia principal por trás do GRAPE é a utilização de um método simples e eficiente [54] para o cálculo do gradiente da fidelidade entre uma transformação ideal e o pulso modulado, o que permite a otimização no desenvolvimento de pulsos. Para se ter uma ideia da eficiência do método, enquanto métodos tradicionais para o cálculo do gradiente da fidelidade de um pulso composto com n passos, descrito por $2n$ parâmetros ligados às fases e amplitudes de cada passo, gasta $2n + 1$ cálculos completos para a determinação do unitário, no GRAPE essa operação é feita com apenas dois cálculos completos. Esse fato permite a otimização de pulsos com um grande número de parâmetros, liberdade que não está presente no SMP. Essa técnica tem sido utilizada tanto em experimentos de RMN [64, 65] e experimentos de informação quântica [66, 67].

No entanto, essas técnicas de otimização sofrem com a crítica de não passarem de “truques”, por dependerem de uma simulação completa do sistema para que forneçam as transformações unitárias desejadas. Como é um fato conhecido [41], a complexidade da simulação de um sistema quântico cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Basicamente, computadores quânticos seriam a ferramenta ideal para o desenvolvimento dessas transformações unitárias. Para maiores detalhes sobre a técnica, veja [68].

⁶Do inglês *Strongly Modulated Pulses*.

⁷Do inglês *GRadient Ascent Pulse Engineering*.

2.4 Estados pseudo-puros

Até aqui, descrevemos como os spin nucleares de uma molécula podem ser usados como q -bits e como realizar a implementação de operações lógicas quânticas sobre esses q -bits a partir de pulsos de RF e de evoluções livres, assim como algumas dificuldades inerentes ao controle de sistemas de spins nucleares. No entanto, igualmente importante à possibilidade de controle sobre sistemas quânticos é a inicialização do sistema em um estado quântico específico.

A forma mais simples de inicializarmos um sistema de q -bits é através de uma medida projetiva. Se o resultado dessa medida for 0, temos o estado inicial $|0\rangle$ preparado e não precisamos fazer nenhuma operação sobre o q -bit. Caso o resultado da medida seja 1, devemos aplicar uma porta *NOT* sobre o q -bit, já que seu estado é $|1\rangle$ e o estado alvo é $|0\rangle$. Esse procedimento pode ser facilmente estendido para sistemas de vários q -bits. No entanto, como veremos adiante, em RMN a medida é sobre todo o ensemble, de forma que medidas projetivas não são possíveis sobre o sistema.

Além disso, experimentos de RMN com líquidos ocorrem a temperatura ambiente, isso leva o estado do sistema a ser descrito por uma distribuição de Boltzmann, que em altas temperaturas é dada por

$$\rho_T = \frac{\exp(-i\beta H)}{Z} = \frac{\mathbb{1}}{2^N} - \beta H, \quad (2.30)$$

em que $\beta = 1/kT$, com k a constante de Boltzmann, com T a temperatura do sistema, Z é a função de partição do sistema ($Z = \text{Tr}(\exp(-i\beta H))$) e H é o hamiltoniano do sistema de N spins. Como temos em geral $\omega_0^i \gg J_{ij}$, nessa equação apenas o termo ligado à interação com o campo externo é levada em conta. Para sistemas de um spin, temos

$$\rho = \frac{\mathbb{1}}{2} - \frac{\hbar\omega_0}{kT} I_z.$$

É importante notar que para uma temperatura de $300K$ e um campo de $\approx 10T$, temos $\hbar\omega_0/kT \approx 10^{-5}$. Ou seja, o estado de uma amostra líquida a temperatura ambiente é altamente misturado.

O fato do estado térmico ser altamente misturado a temperatura ambiente torna difícil a preparação do sistema de spins no estado fundamental $|00\dots 0\rangle$. Devido a essa dificuldade em preparar estados puros em sistemas de RMN, quase todos os experimentos de processamento de informação quântica por RMN usam os estados pseudo-puros [69–71], algumas vezes chamados estados puros efetivos. Existem várias formas de se preparar os estados pseudo-puros, com destaque para os métodos de médias temporal e espacial.

Um estado pseudo-puro de um sistema de N q -bits é um estado misto da forma

$$\rho = \frac{1 - \epsilon}{2^N} \mathbb{1} + \epsilon |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (2.31)$$

em que $|\psi\rangle$ é um estado puro, $\mathbb{1}$ é a matriz identidade, associada com um estado maximamente misturado (com o sistema com probabilidade igual de ser encontrado em um estado qualquer), e ϵ é uma medida da pureza do estado. Cabe notar que esse estado possui todas as simetrias do estado puro $|\psi\rangle$. Como os processos de computação quântica ocorrem por meio de transformações unitárias, a evolução da componente dos estados pseudo-puros ligada ao estado $|\psi\rangle$ sob ação dessas transformações unitárias é exatamente igual à evolução de $|\psi\rangle$. Dessa forma, em experimentos de processamento de informação quântica por RMN os estados pseudo-puros são usados na inicialização de algoritmos e/ou outros processos computacionais, com a parte pura no estado $|\psi\rangle = |00 \dots 0\rangle$.

Apesar da evolução do estado pseudo-puro ser equivalente à evolução de estados puros, na medida sobre o sistema é que a diferença entre os dois estados é mais pronunciada. Essa diferença se deve ao fato de que o termo de mistura máxima pode fornecer o resultado de uma medida, em vez da parte pura desejada. No entanto, em RMN a detecção do sistema não é influenciada pela parte da identidade, ou seja, os espectros de RMN oferecem informação apenas sobre a parte pura do estado pseudo-puro. Cabe deixar claro que a intensidade do sinal é dependente da pureza, o que leva estados pseudo-puros a terem um sinal muito menos intenso que o de estados puros.

Esse pequeno sinal dos experimentos de RMN fez com que rapidamente se notasse que os experimentos com líquidos à temperatura ambiente não poderiam levar a sistemas de muitos q -bits, devido ao sinal de um sistema de N q -bits ser proporcional a $1/2^N$ [72] no limite de altas temperaturas. Esse efeito limita os experimentos de computação quântica com líquidos, baseados em estados pseudo-puros, a uma quantidade entre 10 e 20 q -bits [73].

A preparação de estados pseudo-puros via média temporal [69] usa a linearidade do sinal de RMN (discutido na próxima Seção) com a matriz densidade, fazendo-se a média de vários experimentos diferentes com estados iniciais que diferem por transformações unitárias adequadas. Tal esquema de preparação demanda um número de experimentos que cresce exponencialmente com o número de q -bits, o que limita a sua aplicabilidade a sistemas com poucos spins.

Os métodos baseados em médias espaciais [70, 71] não demandam a realização de vários experimentos, o que os torna menos custosos experimentalmente no que diz respeito à quantidade de medidas sobre o sistema. Na preparação desses estados são usados gradientes de campo, além dos campos de RF e evoluções livres. Esses gradientes de campo são necessários para o aumento da pureza dos estados pseudo-puros, já que a pureza é invariante por transformações unitárias.

Uma terceira forma de se preparar os estados pseudo-puros é a partir do método conhecido como rotulagem lógica [69, 74], que usa um número maior de spins para definir o estado pseudo-puro de um subconjunto desses spins. Apesar desse esquema de preparação sequer utilizar operações sobre o sistema de spins, consistindo apenas de uma escolha adequada da base computacional $\{|00\dots 0\rangle, |00\dots 1\rangle, \dots, |11\dots 1\rangle\}$ entre os níveis de energia do sistema, a aplicação das portas lógicas torna-se altamente complexa, já que os spins do sistema não são mais os q -bits lógicos do sistema.

Estados pseudo-puros e operadores produto. Uma forma conveniente de se descrever os estados pseudo-puros é utilizando-se a base de operadores produto. Por exemplo, o estado pseudo-puro $|00\rangle\langle 00|$ é descrito nessa base como $I_z + S_z + I_z S_z$, em que o termo da identidade foi negligenciado por não ser observável no sinal de RMN. A utilização dessa base facilita na visualização do efeito de transformações unitárias e não-unitárias sobre os q -bits, facilitando a construção de sequências de pulsos para a preparação de estados e a implementação de operações lógicas. A matriz de traço nulo que trata apenas da parte observável em RMN é dita matriz desvio.

2.4.1 Pulsos de gradientes de campo

Antes de passarmos à descrição dos métodos de preparação de estados pseudo-puros via métodos de médias espaciais, cabe uma pequena discussão sobre os gradientes de campo. Os gradientes de campo criam uma inomogeneidade na direção z do campo magnético sentido pela amostra, o que tem o efeito de uma transformação não-unitária sobre o macroestado do sistema. A aplicação desses gradientes de campo é necessária, no contexto de computação quântica, na preparação de estados pseudo-puros e na reprodução da evolução não-unitária de um sistema gerada por uma medida forte (veja a Seção 2.5.4 adiante).

Em uma região em que o campo gerado pelo gradiente é $B(z)$ (Figura 2.4), a evolução é dada por

$$H = H_0 + \hbar B(z) \sum_n \gamma_n I_z^i, \quad (2.32)$$

em que o índice i se refere a cada spin do sistema. Por hipótese, temos que o hamiltoniano do sistema comuta⁸ com I_z . Esse é o caso que estamos interessados, de amostras líquidas a temperatura ambiente. Assim, podemos considerar apenas o efeito da interação com o gradiente de campo magnético, já que a evolução sob o hamiltoniano do sistema (com o campo estático) adiciona apenas um fator multiplicativo à matriz densidade.

Como o termo de gradiente não depende do tempo, a matriz densidade evolui de acordo

⁸Em diversos casos em que essa condição não é satisfeita, é possível simplificar o hamiltoniano através de uma aproximação secular [75] de modo que o hamiltoniano simplificado a satisfaça.

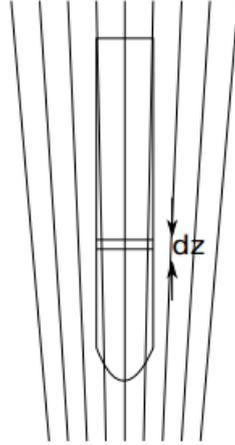


Figura 2.4: Esquema de uma amostra de RMN e linhas de campo em uma região com gradiente.

com

$$\rho(t) = e^{-iB(z)t \sum \gamma_n I_z^n} \rho(0) e^{iB(z)t \sum \gamma_n I_z^n}. \quad (2.33)$$

Usando a base de autoestados de I_z , $|m_1, m_2, \dots, m_N\rangle$ que por simplicidade vamos denotar por $|M\rangle$, é fácil ver que um elemento da matriz densidade evolui com

$$\langle M' | \rho(t) | M \rangle = \langle M' | \rho(0) | M \rangle e^{iB(z)t \sum \gamma_n \delta m_n}, \quad (2.34)$$

em que $\delta m = m - m'$. Como o sinal observado é a média do sinal de toda a amostra, podemos integrar na direção z para obter a média. Supondo que o campo gerado ao aplicar um gradiente tenha a forma $B(z) = \alpha z$, temos

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} e^{iB(z)t \sum \gamma_n \delta m_n} dz = \frac{\sin(\alpha L t \sum \gamma_n \delta m_n)}{\alpha L t \sum \gamma_n \delta m_n}. \quad (2.35)$$

Vemos então que, ao final da aplicação do gradiente por um tempo suficientemente longo, os elementos da matriz densidade que satisfazem $\delta m \neq 0$ são anulados. No caso de um sistema heteronuclear, em que os fatores giromagnéticos são distintos, o gradiente elimina todos os elementos fora da diagonal. Uma complicação aparece no caso de sistemas homonucleares, nos quais podemos ter $\delta m = 0$ mesmo para termos fora da diagonal (as chamadas coerências de ordem zero⁹), que também não sofrem a ação do gradiente.

É importante notar que a aplicação do gradiente de campo magnético por si só não é uma

⁹Um estado $|m_1, m_2, \dots, m_N\rangle$ tem número quântico $\mu = m_1 + m_2 + \dots + m_N$. Coerências de ordem p_{rs} podem ser entendidas como os termos da matriz densidade de estados (de cada q -bit) com números quânticos μ_r e μ_s tais que $p_{rs} = |\mu_r - \mu_s|$ [39]

operação não-unitária, dado que o gradiente é apenas um campo magnético que varia ao longo da amostra. O que torna o efeito dele não-unitário é a média sobre a amostra, que acontece apenas na aquisição de dados.

2.4.2 Preparação de estados

Aqui descreveremos os métodos de preparação de estados pseudo-puros, via métodos de médias espaciais [70, 71]. Para uma descrição de como preparar estados pseudo-puros via média temporal, veja [22, 69]. Começaremos pela primeira abordagem apresentada na literatura [70].

A ideia na preparação de estados via média espacial é o uso dos gradientes de campo para que coerências indesejadas sejam removidas. Esse método pode ser facilmente entendido usando-se os operadores produto. A partir do estado térmico de um sistema de dois q -bits homonucleares, $I_z + S_z$, a sequência de transformações

$$\begin{aligned}
I_z + S_z &\xrightarrow{(60^\circ S_x)} I_z + \frac{1}{2}S_z - \frac{\sqrt{3}}{2}S_y \\
&\xrightarrow{(\nabla)} I_z + \frac{1}{2}S_z \\
&\xrightarrow{(45^\circ I_x)} \frac{1}{\sqrt{2}}I_z - \frac{1}{\sqrt{2}}I_y + \frac{1}{2}S_z \\
&\xrightarrow{(\text{acop. J})} \frac{1}{2}I_z - \frac{1}{2}I_x + \frac{1}{2}2I_xS_z + \frac{1}{2}S_z + \frac{1}{2}2I_zS_z \\
&\xrightarrow{(\nabla)} \frac{1}{2}I_z + \frac{1}{2}S_z + \frac{1}{2}I_zS_z,
\end{aligned}$$

em que ∇ indica a aplicação de gradiente, “acop. J” indica um período de evolução livre do sistema de duração $1/2J$ e $I_i(S_i)$ indica uma rotação sobre o spin $I(S)$, na direção i . Novamente, aqui e no decorrer da Seção, o estado do sistema é descrito utilizando a matriz desvio.

Para sistemas heteronucleares essa sequência pode ser simplificada para

$$\begin{aligned}
I_z + S_z &\xrightarrow{(45^\circ(I_x+S_x))} \xrightarrow{(\nabla)} \xrightarrow{(45^\circ I_x)} \xrightarrow{(\text{acop. J})} \xrightarrow{(\nabla)} \\
&\longrightarrow \frac{\sqrt{3}}{8}(I_z + S_z + I_zS_z),
\end{aligned}$$

já que nesses sistemas não é necessária a garantia de que não sejam geradas coerências de ordem zero na matriz densidade, ao contrário dos sistemas homonucleares. Mas, nesses sistemas se faz necessária a aplicação de uma sequência de pulsos para que os dois núcleos possuam a mesma polarização [76].

Uma desvantagem desse método com relação à preparação usando média temporal é que a pureza do estado pseudo-puro não é a máxima possível, já que o gradiente faz com que haja pequenas perdas na intensidade do sinal, ou seja, perdas de pureza do sistema. Um método de

preparação de estados, via média espacial, que contorna esse problema é através da utilização de portas de transferência controlada [71]. Nesse procedimento de preparação de estados, a população do estado fundamental do sistema permanece inalterada ao longo de todo o processo, o que garante a máxima pureza do estado preparado.

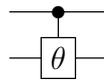
Preparação de estados via portas de transferência controlada. Esse método consiste no uso de rotações controladas seguidas da aplicação de gradientes, que formam as ditas portas de transferência controlada. A atuação dessas portas sobre um estado diagonal qualquer é dada por

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d' \end{pmatrix},$$

com c' e d' dados por

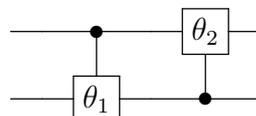
$$\begin{aligned} c' &= \frac{c + d + (c - d) \cos \theta}{2}, \\ d' &= \frac{c + d - (c - d) \cos \theta}{2}, \end{aligned} \quad (2.36)$$

em que θ é o ângulo da rotação controlada. As portas de transferência controlada podem ser representadas, em linguagem de circuitos, como



Notemos que nessa notação o gradiente fica implícito.

Para que um estado pseudo-puro de dois q -bits seja preparado a partir da aplicação de portas de transferência controlada, deve-se aplicar duas portas em sequência, uma com controle no primeiro q -bit e, na sequência, uma com controle no segundo q -bit. O ângulo de rotação de cada uma dessas portas é calculado a partir dos coeficientes do estado térmico do sistema. Por exemplo, no clorofórmio os ângulos são dados por $\theta_1 = 99,5^\circ$ e $\theta_2 = 90^\circ$. Esse esquema de preparação pode ser ilustrado pelo circuito



As portas de transferência controlada de um ângulo θ , com controle no primeiro q -bit, podem ser implementadas por meio da sequência de pulsos dada por

$$R_y^2\left(\frac{\pi}{2}\right) R_x^2(\pi) U_J\left(\frac{\theta}{2\pi J}\right) R_z^1\left(\frac{\theta}{2}\right) R_z^2\left(\frac{\theta}{2}\right) R_y^2\left(\frac{\pi}{2}\right), \quad (2.37)$$

em que os sobrescritos indicam o spin que é excitado e os subscritos as fases dos pulsos. U_J é uma evolução livre no hamiltoniano do sistema.

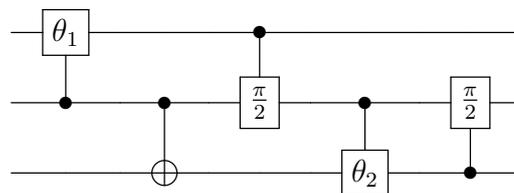
A parte pura do estado de saída do circuito acima é dada por

$$\rho = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{b+c+d}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{b+c+d}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{b+c+d}{3} \end{pmatrix}.$$

Como pode ser visto diretamente nessa matriz, apenas as populações dos níveis excitados são alteradas no processo de preparação do pseudo-puro, o que garante a máxima pureza possível do estado pseudo-puro. Vale mencionar também que esse esquema não gera coerências de ordem zero em sistemas homonucleares e, mesmo para sistemas heteronucleares, não é necessária a equalização de populações como primeiro passo da preparação de estado.

Além disso, esse método pode ser usado em um procedimento iterativo, em que o circuito de preparação de estado é aplicado várias vezes e, independente do estado de entrada no processo, o estado de saída é um estado pseudo-puro [71]. Esse procedimento torna-se interessante em sistemas em que o tempo de coerência do sistema seja grande, já que não é necessária a termalização completa do sistema para que a sequência possa ser aplicada e o estado pseudo-puro corretamente preparado.

Para a preparação de estado em sistemas com mais q -bits, as portas de transferência controlada devem ser aplicadas somente nos spins em que o acoplamento seja mais forte, a fim de otimizar o tempo gasto na preparação de estados. Como exemplo, o seguinte circuito pode ser usado na preparação do estado $|000\rangle\langle 000|$ em um sistema de 3 q -bits



2.5 Medidas, análise de espectros e tomografia de estado

Até o momento, descrevemos como caracterizar os q -bits por meio dos spins nucleares, como implementar as portas lógicas e como inicializar o sistema para que um processo de computação quântica seja executado em um sistema de RMN em líquidos. A última parte para a descrição completa de um processo de RMN é a saída do experimento, ou seja, a descrição de como são feitas as medições sobre o sistema, assim como qual a informação que o processo de medida oferece sobre o sistema. Nessa Seção faremos uma breve descrição de como o sinal de RMN é obtido e como é feita a reconstrução do operador densidade do sistema [77].

Como já foi mencionado anteriormente, em um sistema de RMN não é possível que se façam medidas sobre um único spin. Nesses sistemas, é possível a obtenção de informação apenas sobre toda a amostra, de forma que o resultado de uma medição é o valor esperado da magnetização do sistema. Ou seja, em RMN não temos uma medida sobre o sistema, mas uma média espacial das medidas sobre cada um dos spins da amostra.

A magnetização transversal de um sistema de N spins é dada por

$$\langle I \rangle = \text{Tr}(\rho(t)I_-) = \text{Tr}(\rho(t)(I_x - iI_y)), \quad (2.38)$$

em que $I_i = \sum_k^N I_i^k$ é a componente do momento angular total na direção i e $\rho(t) = \exp(-i\frac{H}{\hbar}t)\rho \exp(i\frac{H}{\hbar}t)$, e H é o hamiltoniano do sistema.

2.5.1 Base de operadores produto

Uma base comumente utilizada na descrição dos experimentos de RMN, como já dito anteriormente, é a base de operadores produto. Essa base é formada pelos produtos tensoriais dos operadores dados por

$$\{I_0, I_1, I_2, I_3\} = \{1, 2I_x, 2I_y, 2I_z\}, \quad (2.39)$$

que formam a base de um sistema de um spin. Para sistemas de vários spins, essa base é dada por

$$B_{(n),s} = \otimes_{k=1}^n I_{q_k(s)}, \quad (2.40)$$

em que $q_{k(s)}$ indica k -ésimo elemento da base, como a representação na base 4 do inteiro s . Por exemplo, a base de um sistema de 2 spins é dada por

$$\{\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes 2I_x, \mathbf{1} \otimes 2I_y, \mathbf{1} \otimes 2I_z,$$

$$\begin{aligned} & 2I_x \otimes \mathbb{1}, 2I_x \otimes 2I_x, 2I_x \otimes 2I_y, 2I_x \otimes 2I_z, \\ & 2I_y \otimes \mathbb{1}, 2I_y \otimes 2I_x, 2I_y \otimes 2I_y, 2I_y \otimes 2I_z, \\ & 2I_z \otimes \mathbb{1}, 2I_z \otimes 2I_x, 2I_z \otimes 2I_y, 2I_z \otimes 2I_z \}. \end{aligned}$$

Para deixar a notação da Eq. (2.40) mais clara, o elemento B_{21} é dado pelo elemento da terceira linha e segunda coluna, $2I_y \otimes 2I_x$. Sem perda de generalidade, podemos indicar os elementos da base como um produto de matrizes, com $B_{21} = 4I_y I_x$, por exemplo. Essa é a notação que será usada daqui em diante.

A base de operadores produto é ortonormal com relação ao seguinte produto interno no espaço de Hilbert-Schmidt

$$(A, B) \equiv \frac{1}{2^N} \text{Tr}(A^\dagger B), \quad (2.41)$$

em que N é o número de spins. Essa propriedade de ortonormalidade nos permite descrever o operador densidade de um sistema na forma

$$\rho = \frac{1}{2^n} \mathbb{1} + \sum_s^{4^N - 1} \rho_s B_{(n),s}, \quad (2.42)$$

em que ρ_s é um número real dado por $\rho_s = (\rho, B_{(n),s})$.

2.5.2 Análise do sinal

Como dissemos no início da Seção, o sinal de RMN é devido à magnetização dos spins precessando no campo externo. O sinal adquirido, o FID (do inglês *Free Induction Decay*), é proporcional à taxa de variação temporal do fluxo magnético induzido na bobina de detecção do espectrômetro. O sinal guarda a informação sobre a magnetização transversa instantânea da amostra durante o processo de detecção. A magnetização transversa é dada pela Eq. (2.38),

$$\langle I_- \rangle = \text{Tr}(\rho(t) I_-) = \text{Tr} \left(\exp \left(-i \frac{H}{\hbar} t \right) U_P \rho_0 U_P^\dagger \exp \left(i \frac{H}{\hbar} t \right) (I_x - i I_y) \right), \quad (2.43)$$

em que ρ_0 é o estado do sistema antes da medida e U_P é um pulso de leitura, que é um pulso de $\pi/2$ nas direções x ou y . É importante notar que ρ_0 representa o estado de uma molécula individual, e não da amostra toda. Como o sinal de RMN oferece uma média da magnetização transversa sobre toda a amostra, não há nenhum problema na detecção oferecer informação tanto sobre I_x quanto I_y , que são observáveis não compatíveis.

Para uma análise mais detalhada da Eq. (2.43), vamos considerar aqui apenas hamiltonia-

nos dados pela Eq. (2.8):

$$H = - \sum_{i=1}^N \hbar \omega_0^i I_z^i + \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j. \quad (2.44)$$

Nesse caso, utilizando a ciclicidade do traço na Eq. (2.38), temos

$$S(t) = \sum_k^n \text{Tr}(\rho_0 O_{P,k}(t)), \quad (2.45)$$

com o operador $O_{P,k}(t)$ dado por

$$O_{P,k}(t) = U_P^{-1} e^{iHt} I_{k-} e^{-iHt} U_P. \quad (2.46)$$

Um ponto interessante da Eq. (2.45) é que o FID pode ser usado para se investigar as propriedades da matriz densidade do sistema, ρ_0 . Além disso, o FID possui informação sobre várias frequências do espectro, como pode ser visto facilmente pela substituição do hamiltoniano da Eq. (2.8) em (2.46).

Para descrevermos $O_{P,k}(t)$ em detalhes, fazemos a seguinte decomposição do operador de evolução

$$\exp\left(-i\frac{H}{\hbar}t\right) = U_J U_Z, \quad (2.47)$$

em que U_J é o operador de evolução ligado ao acoplamento J ,

$$U_C^{-1} = \prod_{i < j} \exp(i2\pi J_{ij} I_z^i I_z^j t), \quad (2.48)$$

e U_Z é o operador de evolução ligado à interação com o campo externo e o deslocamento químico,

$$U_Z = \prod_i^N \exp(i\omega_0^i I_z^i t). \quad (2.49)$$

Como normalmente temos mais de uma espécie nuclear nas amostras e a magnetização de apenas uma espécie é medida por vez, podemos nos concentrar em cada ressonância do sistema individualmente. Assim, o sinal de uma ressonância fica

$$S_{P,k} = \text{Tr}(\rho_0 U_P^{-1} U_J^{-1} I_{k-} U_J U_P) e^{i\omega_k t}, \quad (2.50)$$

em que a relação de comutação $U_Z^{-1}I_{k-}U_Z = I_{k-}e^{-i\omega_0^k t}$ foi usada [39]. Expandindo as exponenciais da Eq. (2.48) e usando em conjunto com as relações as relações $[I_{mz}, I_{k-}] = -\delta_{mk}I_{k-}$ e $I_{mz}^2 = \frac{1}{4}\mathbb{1}$, válidas para sistemas de spin 1/2, temos a relação de comutação

$$\begin{aligned} & e^{i2\pi J_{hj}I_{hz}I_{jz}t}I_{k-}e^{-i2\pi J_{hj}I_{hz}I_{jz}t} = \\ & \frac{1}{2}[(I_{k-} - 2I_{jz}I_{k-})e^{i\pi\delta_{hk}J_{jk}t} + (I_{k-} + 2I_{jz}I_{k-})e^{i\pi\delta_{hk}J_{jk}t}]. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Essa equação mostra que cada termo de interação do hamiltoniano (2.44) ou não faz nada (caso em que $\delta_{hk} = 0$) ou divide cada operador I_{k-} em dois operadores, $E_{j\pm}I_{k-} = (I_{k-} \pm 2I_{jz}I_{k-})$. Os operadores $E_{j\pm}$ são projetores que expandem o subespaço do operador I_{jz} , com autovalor $\pm 1/2$. Dessa forma, os operadores $E_{j\pm}I_{k-}$ podem ser vistos como operadores de transição entre os níveis de energia do sistema.

Em um sistema de N spins temos $N - 1$ componentes de U_J que não comutam com I_{k-} . Como cada componente atua de forma independente, já que comuta com os $E_{j\pm}$, temos a formação de um multipletto com 2^{N-1} operadores em cada spin. Cada um desses operadores contribui com duas frequências $\omega_0^k \pm \sum_{i \neq k} 2\pi J_{ik}$.

Análise em sistemas heteronucleares de dois q-bits. Passemos agora a uma análise mais detalhada do FID, em um sistema de apenas dois q-bits. Nesses sistemas, a Eq. (2.51) é dada por

$$\begin{aligned} & e^{i2\pi JI_{1z}I_{2z}t}I_{1-}e^{-i2\pi JI_{1z}I_{2z}t} = \\ & \frac{1}{2}[(e^{-i\pi Jt} + e^{i\pi Jt})I_{1-} + (e^{-i\pi Jt} - e^{i\pi Jt})2I_{2z}I_{1-}]. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Essa equação pode ser escrita na forma matricial dada por

$$\frac{1}{2}(e^{-i\pi Jt}, e^{i\pi Jt}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{1-} \\ 2I_{1-}I_{2z} \end{pmatrix}.$$

Substituindo essa expressão no lugar do termo $U_J^{-1}I_{1-}U_J$, temos a seguinte expressão para o FID

$$S_{P,1}(t) = \frac{1}{2}(e^{i(\omega_1 - \pi J)t}, e^{i(\omega_1 + \pi J)t}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Tr(\rho_0 \tilde{I}_{1-}) \\ Tr(\rho_0 2\tilde{I}_{1-}\tilde{I}_{2z}) \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

em que $\tilde{I}_{1-} = U_P^{-1}I_{1-}U_P$ (o mesmo para $I_{1-}I_{2z}$). Aplicando uma transformada de Fourier,

dada por

$$S(\omega) = \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i\omega t} S(t),$$

em (2.53), temos duas componentes de frequência contribuindo para o espectro. Uma dada por

$$S_{P,1}(\omega_1 - \pi J) = \frac{1}{2}(1, 0) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{Tr}(\rho_0 \tilde{I}_{1-}) \\ \text{Tr}(\rho_0 2\tilde{I}_{1-} \tilde{I}_{2z}) \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

e uma componente associada à frequência $\omega = \omega_1 + \pi J$, obtida trocando o vetor linha $(1, 0)$ por $(0, 1)$. Essas duas componentes podem ser descritas por meio da equação matricial

$$\begin{pmatrix} S_{P,1}(\omega_1 - \pi J) \\ S_{P,1}(\omega_1 + \pi J) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{Tr}(\rho_0 \tilde{I}_{1-}) \\ \text{Tr}(\rho_0 2\tilde{I}_{1-} \tilde{I}_{2z}) \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

Como podemos observar por meio dessa equação, as intensidades das linhas de um espectro de RMN são ligadas à combinações lineares dos valores esperados de observáveis específicos, I_{1-} e $2I_{1-}I_{2z}$ para o espectro do spin 1 em um sistema de 2 spins.

Para sistemas com mais q -bits, a análise do sinal pode ser feita de maneira semelhante, com o operador de detecção do sistema, $O_{P,k}(t)$, dado para sistemas de N spins na forma

$$O_{P,k}(t) = U_P^{-1} \left(\frac{1}{2^{n-1}} u_k H_{N-1} v_k \right) U_P, \quad (2.56)$$

na qual H_{N-1} é uma matriz de Hadamard de ordem $N - 1$

$$u_k = (e^{i\omega_k t}) \otimes \left(\otimes_{j \neq k} (e^{-i\pi J_{jk} t}, e^{i\pi J_{jk} t}) \right)$$

e

$$v_k = (I_{k-}) \otimes \left(\otimes_{j \neq k} \begin{pmatrix} 1 \\ 2I_{jz} \end{pmatrix} \right).$$

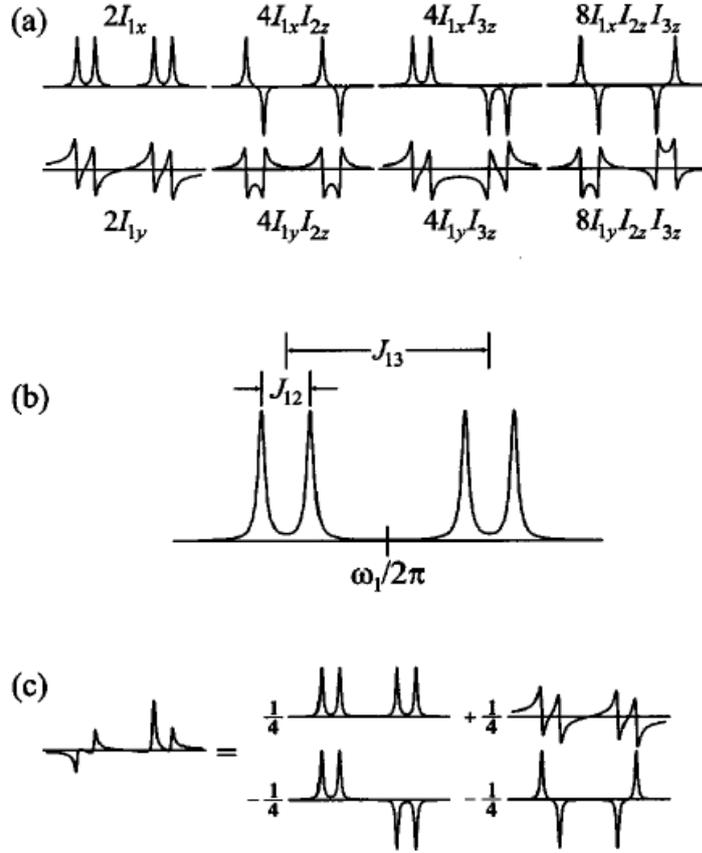


Figura 2.5: Espectros dos operadores da base de espectros. (a) Os oito espectros dos operadores da base de espectros, de um spin i . Cada um desses espectros é obtido de um operador densidade igual a cada um desses operadores. A presença do operador I_{jz} faz com que as linhas associadas à interação do spins que tenha J_{ij} tenham sinais opostos. (b) Nesse exemplo, J_{12} é o acoplamento mais fraco e J_{13} o forte. (c) Exemplo da descrição de um espectro como uma combinação linear dos espectros básicos. Originalmente em [77].

Por exemplo, em um sistema de 3 spins, temos

$$\begin{pmatrix} S_{P,1}(\omega_1 - \pi J_{12} - J_{13}) \\ S_{P,1}(\omega_1 + \pi J_{12} - J_{13}) \\ S_{P,1}(\omega_1 - \pi J_{12} + J_{13}) \\ S_{P,1}(\omega_1 + \pi J_{12} + J_{13}) \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Tr(\rho_0 \tilde{I}_{1-}) \\ Tr(\rho_0 2\tilde{I}_{1-}\tilde{I}_{2z}) \\ Tr(\rho_0 2\tilde{I}_{1-}\tilde{I}_{3z}) \\ Tr(\rho_0 4\tilde{I}_{1-}\tilde{I}_{2z}\tilde{I}_{3z}) \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Como se pode ver pela última expressão, os espectros em um sistema de três spins são formados por combinações lineares dos operadores $2I_{1x}$, $4I_{1x}I_{2z}$, $4I_{1x}I_{3z}$, $8I_{1x}I_{2z}I_{3z}$, na parte real, e de $2I_{1y}$, $4I_{1y}I_{2z}$, $4I_{1y}I_{3z}$, $8I_{1y}I_{2z}I_{3z}$, na parte imaginária. Permutando-se os operadores I_x e I_y pelos spins 2 e 3, obtemos todos os operadores que formam os espectros de um sistema

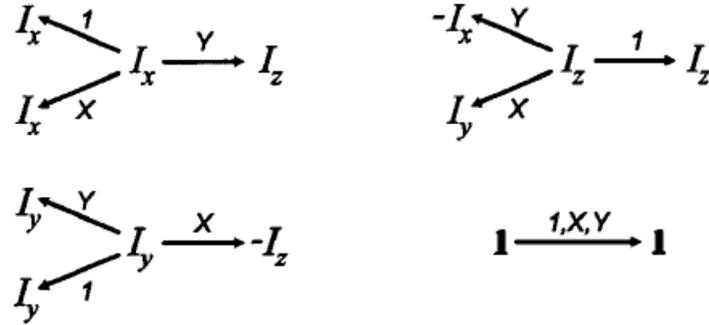


Figura 2.6: Regra para o mapeamento dos operadores produto na base de espectros. Originalmente em [77].

de três spins. Esses operadores são um conjunto ortonormal, já que são um subconjunto da base de operadores produto, e são ditos base de espectros. Assim, um espectro qualquer pode ser decomposto em uma combinação linear desses espectros (oito em cada multipletto), que são normalizados no sentido de que o quadrado de um desses espectros pode ser usado como a unidade (no cenário sem imperfeições experimentais). Na Fig. 2.5 são mostrados esses oito espectros básicos de um sistema de três spins, assim como a formação dos multipletos a partir das interações no sistema.

Um ponto importante de ser observado nas equações (2.55) e (2.57) é que ao invertermos esses sistemas lineares, passamos a ter informação sobre a matriz densidade do sistema antes da detecção. Uma propriedade importante dessas equações é que as matrizes de Hadamard são autoinvertíveis, ou seja, $H_m^{-1} = \frac{1}{2^m} H_m$.

2.5.3 Tomografia de estado

No processamento de informação quântica, um passo importante é a caracterização do estado do sistema ao fim de um processo computacional. Tal passo possibilita mensurar a fidelidade [41] na preparação de um estado ou na implementação de uma porta lógica, ou ainda na estimativa de erros na implementação experimental. Esse procedimento de reconstrução da matriz densidade de um sistema é conhecido como tomografia de estado quântico. Os processos de tomografia de estado demandam a realização de um conjunto de medições sobre o sistema, já que experimentalmente apenas uma pequena parte dos $2^{2N} - 1$ elementos da matriz densidade são acessíveis.

O passo importante no procedimento de tomografia de estado em sistemas de spin $1/2$ é notar que qualquer elemento da base de operadores produto pode ser mapeado em um dos operadores da base de espectros. Isso é possível por meio de uma rotação seletiva de $\pi/2$, em um ou mais dos spins, ao longo dos eixos x ou y (ou ausência de pulso). Por exemplo,

n	Conjuntos de pulsos
1	X, I
2	XX, II, IX, IY
3	$XXX, III, IIY, XYX, YII, XXY, IYY$
4	$XXXX, IIII, IIIY, YYYX, IIIY, XYXX, YXYI, IXYI, IIIX, XIYY, YXII, YYXY, XYXI, IIYX, IXIY, IIXI, IYIY$

Figura 2.7: Conjuntos de pulsos de leitura para a tomografia de estado em sistemas de 1 a 4 spins. Originalmente em [77].

uma rotação de $\pi/2$ na direção $-y$ sobre um spin faz com que a magnetização ao longo do eixo z se torne observável na parte real do espectro. Como o termo ligado à identidade não é observável, precisamos de dois experimentos para caracterizar completamente o estado de um sistema de um spin. É necessário comentar que além desses experimentos, mais um espectro (por núcleo) é necessário para que o procedimento de tomografia de estado seja completo. Esse espectro deve ser de um estado necessariamente conhecido, por dois motivos: o primeiro é para que esse espectro seja a referência para o acerto das fases dos espectros do estado a ser tomografado. A segunda razão é servir como normalização dos espectros, para que apenas os valores absolutos da matriz densidade sejam levados em conta. Tal fato se deve à identidade não ser um observável em sistemas de RMN, o que impede de se definir uma normalização a partir apenas das medidas sobre o estado a ser tomografado.

O mapeamento dos elementos da base de operadores produto na base de espectros pode ser feito diretamente, obedecendo à regra demonstrada na Fig. 2.6. Com essa regra em mãos, pode-se obter o conjunto de pulsos de leitura que mapeia todos os elementos da base do espaço de estados na base de espectros. Um fato que deve ser mencionado aqui é que não são necessários todos os 3^N pulsos possíveis sobre um sistema de N spins para que a matriz densidade seja tomografada. No máximo, são necessários $3^N/2$ multipletos para caracterizar completamente a matriz densidade de um sistema com N spins [77]. Isso implica em um número mínimo de $3^N/2N$ experimentos para sistemas homonucleares, já que todos os multipletos são lidos em um único espectro. Na Fig. 2.7, temos os conjuntos de pulsos que podem ser usados para a caracterização do estado do sistema pela tomografia de estado.

2.5.4 Medidas fortes e RMN

Como mencionado anteriormente, as medidas sobre um sistema de spins nucleares apenas tem acesso ao macroestado do sistema, ou seja, as medidas são sobre todas as moléculas da amostra. Uma importante ferramenta para o processamento de informação quântica é a possibilidade de se realizar medidas projetivas sobre o sistema quântico. Por exemplo, nos protocolos de teleporte quântico [10, 78, 79] é necessária a realização de medidas projetivas sobre o sistema

para que o teleporte do estado quântico seja realizado com sucesso. Apesar de não ser possível realizar as medidas projetivas sobre os microestados da amostra, existem formas de simular a dinâmica não-unitária de todo o ensemble, causada pela realização de uma medida projetiva sobre o sistema.

Uma possibilidade é usar a dinâmica não-unitária que ocorre no processo de relaxação do sistema, já que os processos de descoerência (no caso de RMN, relacionados à T_2) são equivalentes a uma medida projetiva na direção z sobre o sistema [80]. Esse efeito pode ser utilizado em sistemas que possuam uma relação de tempos de descoerência adequados, como na molécula de tricloroetileno utilizada na realização experimental do teleporte quântico por RMN [81](veja a Subseção 3.2.3 no próximo Capítulo). Nesse caso, os dois núcleos de ^{13}C possuem tempos de coerência muito menores que o tempo de coerência do ^1H , o que faz com que os dois carbonos não tenham coerência alguma enquanto o núcleo de hidrogênio mantém sua coerência. Assim, ajustando-se o tempo que o sistema fica sujeito à relaxação, pode-se obter uma medida projetiva apenas sobre uma das espécies.

Uma desvantagem de se realizar as medidas projetivas dessa forma é que, enquanto os processos ligados à perda de coerência atuam, os processos ligados à termalização do sistema estão atuando simultaneamente. Esse processo de termalização faz com que se perca a fidelidade na implementação de todo o protocolo. Como mencionado anteriormente, é possível de se implementar dinâmicas não-unitárias em sistemas de RMN pelo uso dos gradientes de campo [76, 82]. Em particular, essa possibilidade torna possível a realização de medidas fortes sobre o sistema. No entanto, como em sistemas de RMN só é possível obter informação sobre o macroestado da amostra, não existe a possibilidade de se fazer medidas seletivas.

A ideia principal desse método de se realizar as medidas fortes sobre o spins nucleares é a possibilidade de uma descoerência forçada sobre um dos spins do sistema, a partir da criação de uma aleatoriedade na orientação dos spins da amostra pela introdução do gradiente de campo. Como essa inhomogeneidade de campo é introduzida na direção z , a ideia é girar o eixo de medidas para a direção z , e então aplicar uma sequência de gradientes e pulsos de refocalização. Ao se fazer isso, as coerências estarão ao longo do eixo z e serão preservadas após a aplicação do gradiente.

No caso de um sistema de dois spins, uma sequência possível para a realização da medida projetiva na direção x , sobre o spin 2, é dada pela sequência [76]

$$R_y^1(\pi/2) \longrightarrow \nabla_z \longrightarrow R_y^2(\pi) \longrightarrow \nabla_z.$$

Essa sequência de pulsos anula toda a magnetização presente no plano $y - z$, deixando a magnetização apenas ao longo do eixo x , em ambos sentidos. No caso de um estado pseudo-puro $|\phi^+\rangle$, por exemplo, metade da magnetização fica ao longo de $+x$ e a outra metade na

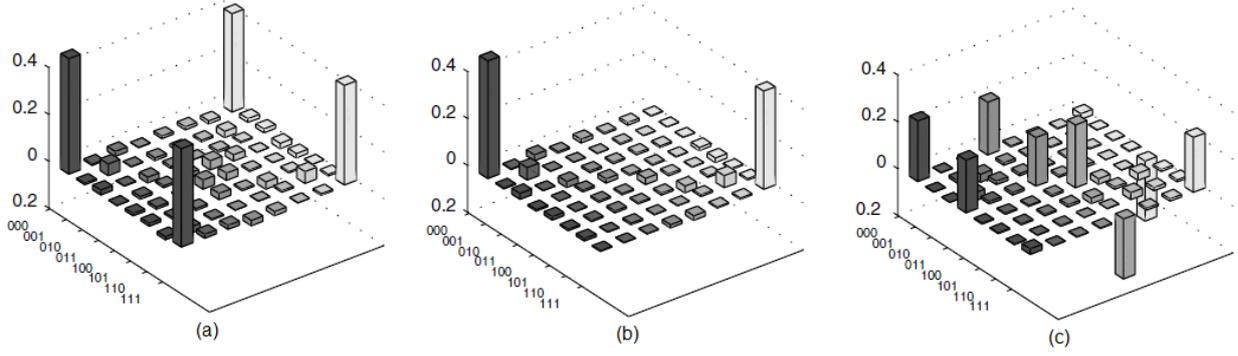


Figura 2.8: (a) Tomografia do estado $|GHZ\rangle$. (b) Tomografia do estado após uma medida forte na direção z , dado na Eq. (2.59). (c) Tomografia do estado após uma medida forte na direção x , dado na Eq. (2.60). Original em [82].

direção $-x$. A matriz desvio do sistema, após essa medida, é dada por $I_x^1 I_x^2$, que descreve exatamente o estado do sistema após uma medida forte na direção x . Já que o estado após uma medida forte não-seletiva sobre o estado $|\phi^+\rangle$ é dado por

$$\rho = E_+^2 \otimes |0\rangle\langle 0| + E_-^2 \otimes |1\rangle\langle 1|, \quad (2.58)$$

em que E_\pm^1 são os projetores na direção z sobre o spin 1.

Em um sistema de três q -bits, dado um estado $|GHZ\rangle = \frac{1}{2}(|000\rangle + |111\rangle)$, se fizermos uma medida projetiva ao longo de z sobre o spin 1, temos a matriz densidade do sistema dada por

$$\rho = E_+^1 \otimes |00\rangle\langle 00| + E_-^1 \otimes |11\rangle\langle 11|, \quad (2.59)$$

no qual os operadores E_\pm^1 são os projetores ligados às medidas na base computacional. Como o estado $|GHZ\rangle$ pode ser escrito na forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|+\rangle|\phi^+\rangle + |-\rangle|\phi^-\rangle),$$

em que $|\pm\rangle$ são os autoestados de I_x e $|\phi^\pm\rangle$ são estados da base de Bell. Então, após a realização de uma medida no eixo x sobre o primeiro q -bit, temos o estado do sistema dado por

$$\rho = E_+^1 \otimes |\phi^+\rangle\langle\phi^+| + E_-^1 \otimes |\phi^-\rangle\langle\phi^-|. \quad (2.60)$$

Esse estado é uma mistura dos estados de Bell, rotulados pelo q -bit auxiliar que indica o resultado da medida. Esses dois estados são indistinguíveis, de forma que apenas com o uso da informação do q -bit auxiliar esses estados podem ser distinguidos.

Nesse tipo de sistema, temos a dificuldade adicional de se isolar mais de um spin do efeito

do gradiente. Isso implica em uma quantidade maior de operações para a implementação da medida forte sobre o sistema. Tanto a refocalização dos spins que não sofrem a medida necessita de mais pulsos, quanto a quantidade de gradientes aplicados é maior. Uma sequência para a medida forte na direção z sobre o spin 1 é dada por

$$P_z^1 = \nabla_z \rightarrow R_x^2(\pi) \rightarrow \nabla_z \rightarrow R_x^{2,3}(\pi/2)\nabla_z \rightarrow R_{-x}^2(\pi) \rightarrow \nabla_z \rightarrow R_{-x}^{2,3}(\pi/2).$$

Essa sequência cria o mesmo estado do ensemble que uma medida forte sobre cada uma das moléculas na amostra fosse feita, dado na Eq. (2.59). Para uma medida na direção x , basta girar as coerências na direção x , do spin que sofre a medida, para a direção z e então aplicar a sequência que executa a medida na direção z . Essa operação é feita com a aplicação de um pulso de $\pi/2$ com fase $-y$. Ou seja, uma medida na direção x é obtida pela sequência

$$P_x^1 = R_{-y}^1(\pi/2) \rightarrow P_z^1.$$

Na Fig. 2.8, são mostrados os estados tomografados após as medidas nas direções z e x , sobre um estado $|GHZ\rangle$.

2.6 Breve descrição do aparato experimental

Nessa tese, em todos os resultados experimentais é utilizado um espectrômetro de alta resolução, VARIAN Premium Shielded 500MHz. A RMN de alta resolução apresenta algumas características interessantes para se realizar o processamento de informação quântica por RMN, como a alta sensibilidade, maximização da separação de multipletos e a minimização dos efeitos devidos a acoplamentos fortes. Esses três efeitos são devidos, basicamente, ao alto campo magnético B_0 [83]. A discussão sobre o espectrômetro pode ser feita a partir da discussão de seus principais elementos: o magneto, o transmissor de RF, a sonda e o receptor de sinal.

Para tornar possível a alta resolução no domínio da frequência do sinal da RMN, o magneto deve ser capaz de gerar um campo que seja de grande intensidade, homogêneo e estável. A alta intensidade do campo é obtida através de um solenóide supercondutor imerso em um banho de Hélio líquido, com o espectrômetro sendo normalmente denominado a partir da intensidade do campo magnético. Mais exatamente, por meio da frequência de Larmor do 1H .

Para que o campo magnético tenha a homogeneidade desejada, são adicionadas próximas à amostra várias bobinas que geram gradientes de campo que cancelam as inomogeneidades do campo magnético do solenóide supercondutor. A princípio, é desejável que a homogeneidade de campo seja da ordem de uma parte em 10^9 , para garantir que as linhas do espectro tenham uma largura de linha da ordem de $1Hz$.

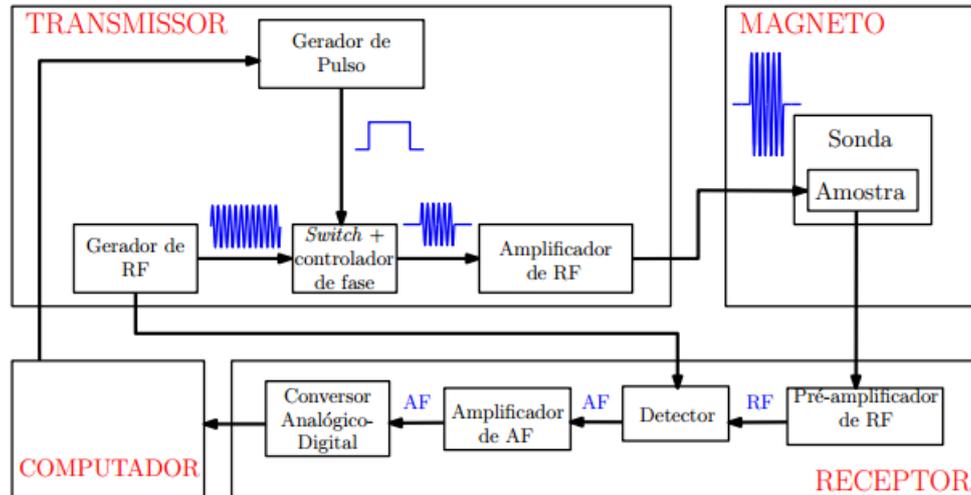


Figura 2.9: Esquema mostrando os elementos essenciais de um espectrômetro de RMN, adequado para trabalhar conjuntamente com a transformada de Fourier implementada no computador. Abreviações: RF é a radiofrequência, e AF a frequência de áudio.

Por fim, no caso de RMN com líquidos, a estabilidade desejada para o campo magnético é obtida pelo que ficou conhecido como o *locking* da frequência do campo. A intensidade do campo B_0 é monitorada pela frequência de um composto de referência, normalmente o sinal do 2H de um solvente enriquecido com deutério, e qualquer variação desse sinal é usada para controlar a intensidade de campos magnéticos suplementares capazes de compensar o desvio no campo principal ou a frequência da RF no transmissor.

Os componentes mais importantes do transmissor de RF (e do espectrômetro) estão mostrados esquematicamente na Fig. 2.9. Um gerador de ondas produz uma voltagem que oscila senoidalmente em uma frequência desejada. Esta saída é cortada em pulsos por uma chave (*switch*) que é aberta ou fechada por um gerador de pulso, controlado pelo computador do espectrômetro. Os pulsos são amplificados e enviados para a sonda de RMN.

A sonda contém a amostra e é a responsável pelo acoplamento do campo de RF aos spins. Também é na sonda que o sinal de RMN proveniente da amostra é coletado. Ela fica localizada exatamente no centro da bobina supercondutora, mas mantendo uma certa distância para que a amostra e a sonda possam permanecer à temperatura ambiente. A componente mais importante da sonda é uma bobina de fios (ou de folha metálica), colocada em volta da amostra, que recebe o pulso enviado pelo transmissor e o aplica na amostra. A corrente alternada na bobina gera um campo magnético com a mesma frequência e fase que aquela selecionada no transmissor. A precessão da magnetização nuclear, excitada por este campo de RF, induz na mesma bobina uma voltagem oscilante, que é o sinal de RMN, que é enviado na sequência para o receptor.

Pode-se melhorar a sensibilidade do espectro através do registro de M sinais de RMN e

depois adicioná-los, para se fazer médias do sinal. A resposta idêntica do espectrômetro, nesse processo de média, é proporcional a M , enquanto um sinal ruidoso inevitável (variando de maneira aleatória de um registro para o outro) dos sinais, são mais lentos e proporcionais a $M^{\frac{1}{2}}$. Portanto, um melhoramento é verificado nesse espectro, pela adição de vários FIDs e é dado pela relação sinal-ruído $M/M^{\frac{1}{2}} = M^{\frac{1}{2}}$.

Pode-se também, na repetição de um mesmo experimento, alternar as fases dos pulsos para cada FID obtido. Isso é chamado de *phase cycling*, que pode ser utilizado para selecionar sinais de RMN que tenham certas propriedades de interesse, enquanto remove outros tipos de sinais. Por exemplo, pode-se selecionar os sinais de um spin nuclear acoplado via interação escalar J com outros spins, enquanto se suprime sinais daqueles spins que não tem parceiros sobre tal interação. Além disso, o *phase cycling* pode ser utilizado para limpar o sinal de RMN de sinais espúrios gerados por imperfeições nos dispositivos eletrônicos do espectrômetro.

2.6.1 Preparação de amostras

Nos experimentos usamos amostras com os q-bits codificados nos núcleos de hidrogênio e carbono. A forma mais abundante do carbono é o ^{12}C , com abundância de 98.93%. Porém, esse isótopo possui spin nulo, o que impossibilita seu uso para RMN. As amostras usadas são enriquecidas, possuindo acima de 99.9% de ^{13}C , que possui spin $S = 1/2$. O hidrogênio não apresenta esse problema, já que sua forma mais abundante é o ^1H (99.98%), cujo núcleo consiste apenas de um próton, tendo spin $S = 1/2$.

Para que não haja interações intermoleculares, a amostra deve ser uma solução de baixa concentração das moléculas de interesse em um solvente que não possua sinal de RMN na região do espectro que estejamos observando. Essa solução é tipicamente de 50mg de soluto com 700 μl de solvente, resultando em concentrações em massa tipicamente na faixa de 5 ~ 9%.

Nos experimentos realizados, a amostra de dois q-bits foi uma solução de clorofórmio enriquecido (CHCl_3 , Fig. 2.10). Os q-bits são codificados nos núcleos de ^1H e de ^{13}C . Com a montagem experimental disponível, essa molécula é bastante conveniente. Primeiro por possuir dois spins com frequências de Larmor muito distintas (em um campo de 11.7T, $\omega_H \approx 500\text{MHz}$ e $\omega_C \approx 125\text{MHz}$), o que nos permite usar pulsos retangulares (Eq. (2.9) na p. 38) seletivamente. Segundo, por apresentar um acoplamento escalar relativamente intenso ($J \approx 215\text{Hz}$), tornando possível aplicar diversas portas lógicas antes que os efeitos de relaxação se tornem pronunciados.

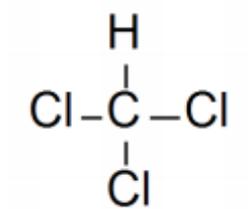


Figura 2.10: Fórmula estrutural da molécula de clorofórmio.

Parte I

Detecção de pseudo-emaranhamento através de testemunha de emaranhamento em RMN

Capítulo 3

Emaranhamento e sua relação com RMN

Neste Capítulo será discutida a relação entre o emaranhamento, apontado como o principal recurso computacional no processamento da informação quântica, com os experimentos de RMN. Depois de discutida essa relação, apresentaremos alguns exemplos de experimentos realizados em RMN no qual o emaranhamento é usado como tal recurso. Maiores detalhes acerca das propriedades do emaranhamento, e suas propriedades ligadas com a geometria do espaço de estados, podem ser encontradas no livro de Zyczkowski [84] ou no artigo de revisão de Horodecki [85]. A relação entre os estados pseudo-puros e o emaranhamento é encontrada em maiores detalhes no livro de Oliveira *et al* [36].

3.1 Algumas propriedades básicas do emaranhamento

Nesta Seção será dada uma definição mais rigorosa e serão discutidas algumas propriedades básicas do emaranhamento, que foi introduzido na Seção 2.2. O emaranhamento é diretamente relacionado à estrutura de produtos tensoriais do espaço de Hilbert-Schmidt, e é uma manifestação física do fato de que nem todos os estados nesse espaço vetorial podem ser descritos como produtos tensoriais dos vetores da base desse estado. Uma definição, para estados puros, é a seguinte: considere dois sistemas A e B , com os estados representados por vetores nos espaços de Hilbert H_A e H_B . Um estado quântico $|\psi\rangle \in H_A \otimes H_B$ é dito emaranhado se não puder ser escrito como um produto tensorial de estados $|\psi\rangle_A \in H_A$ e $|\psi\rangle_B \in H_B$. Em outras palavras, $|\psi\rangle$ é emaranhado se não puder ser escrito na forma

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B. \quad (3.1)$$

Caso contrário, o estado é dito separável. Exemplos de estados separáveis em sistemas de quatro níveis são os estados $|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$ e $|++\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$. Exemplos de estados emaranhados são os estados da base de Bell, $|\phi^\pm\rangle$ e $|\psi^\pm\rangle$ [41].

Uma propriedade sem análogo clássico dos estados emaranhados é o fato de que o estado de cada partícula não é um estado puro, mas uma mistura estatística. Isso implica que os estados individuais das partículas que constituem o sistema não são bem definidos, embora o estado do sistema todo seja bem definido. Nesses sistemas, a propriedade reprodutível é a correlação entre os resultados experimentais de cada partícula do sistema. Na mecânica clássica tal propriedade não é possível, já que o estado de cada partícula sempre é bem definido. Por exemplo, sempre se pode associar posição e momento a uma partícula clássica.

A definição de emaranhamento pode ser facilmente generalizada para sistemas constituídos por N partículas. No entanto, em tais sistemas existem diferentes tipos de emaranhamento entre as partículas. Esses diferentes tipos de emaranhamento são ligados à possibilidade de apenas algumas partes do sistema estarem emaranhadas. Podemos classificar o emaranhamento nesses sistemas a partir da seguinte definição de separabilidade: um estado puro de um sistema de N constituintes é dito k -separável, ou seja, possui k subsistemas não emaranhados, se puder ser escrito como um produto tensorial de k estados:

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2 \otimes \dots \otimes |\psi\rangle_k. \quad (3.2)$$

Se $k = N$ o estado é dito completamente separável, já que não há emaranhamento entre quaisquer dos subsistemas. No entanto, se $k < N$, apenas alguns constituintes estão emaranhados enquanto outras partes do sistema permanecem separáveis. Além de serem classificados quanto à separabilidade, também é comum classificar estados quanto ao número máximo de constituintes emaranhados necessários para gerá-los. Esta classificação leva a seguinte definição: um estado k -separável é dito fabricável por emaranhamento m -partido, ou simplesmente m -fabricável, se os estados $|\psi_i\rangle$ em (3.2) contiverem no máximo m partículas emaranhadas.

Como estados mistos são definidos a partir de combinações lineares convexas dos projetores $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, ligados aos estados puros $|\psi_i\rangle$, a definição de estados emaranhados pode ser facilmente estendida às misturas estatísticas. Nesse caso, um estado ρ é dito k -separável se puder ser escrito como uma combinação linear convexa de estados k -separáveis, ou seja,

$$\rho = \sum_i p_i \rho_{1,i} \otimes \rho_{2,i} \otimes \dots \otimes \rho_{k,i}. \quad (3.3)$$

3.1.1 Critérios de separabilidade

Apesar de o conceito de emaranhamento ser claramente definido, a tarefa de caracterizar se um dado estado é emaranhado ou não é uma tarefa difícil. Em particular, foi mostrado por Gurvitz que esse problema é da classe de complexidade NP -duro [117]. Entretanto, alguns critérios de separabilidade podem ser definidos de forma a dizer se um sistema é emaranhado ou não. Para vários casos particulares, como sistemas bipartidos, existem diversos critérios de separabilidade bem conhecidos. Um critério de separabilidade, necessário e suficiente de forma assintótica, é obtido a partir da definição de testemunhas de emaranhamento e foi proposto por Brandão e Vianna [94]. Esse critério será discutido em detalhes na Seção 3.4.1. Um dos mais conhecidos é o critério de Peres-Horodecki [86, 87] para sistemas bipartidos, que é uma condição necessária para o caso geral de sistemas bipartidos, mas necessária e suficiente nos casos de sistemas bipartidos¹ $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$.

Esse critério se baseia na definição de uma operação sobre o espaço de estados, dita transposição parcial (\mathcal{PT}^2). Dado um sistema bipartido $d \otimes d'$, em um estado descrito pelo operador densidade

$$\rho = \sum_{ij,kl} p_{ij,kl} |i, j\rangle \langle k, l|,$$

a transposição parcial é a operação que mapeia esse operador densidade no operador

$$\mathcal{PT}(\rho) = \sum_{ij,kl} p_{ij,kl} |i, l\rangle \langle k, j|. \quad (3.4)$$

Essa operação preserva a não-negatividade de ρ no caso de um estado separável³. No entanto, se o estado for emaranhado, essa operação pode não preservar a não-negatividade de ρ [86,87]. O critério de Peres-Horodecki pode ser enunciado na seguinte forma: se a transposta parcial de uma matriz densidade ρ apresentar autovalores negativos, então o estado descrito por ρ é emaranhado.

A partir desse critério, pode ser definida uma grandeza para se quantificar o emaranhamento de um dado estado ρ , a negatividade $N(\rho)$. Essa quantidade é definida como

$$N(\rho) = \frac{\|\mathcal{PT}(\rho)\| - 1}{2}, \quad (3.5)$$

¹A notação $d \otimes d'$ indica sistemas quânticos descritos em espaços de Hilbert d e d' dimensionais.

²Do inglês *Partial Transpose*.

³Seja $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$ um estado separável. A transposta parcial desse estado é dada por $\mathcal{PT}(\rho) = \mathcal{PT}(\rho) = \mathcal{PT}(\rho_1 \otimes \rho_2) = \rho_1 \otimes \rho_2^T$. Como ρ_2^T também é uma matriz densidade, temos então que $\rho_2^T \geq 0$, o que implica na não-negatividade de $\mathcal{PT}(\rho)$.

na qual $\|X\| = \sqrt{X^\dagger X}$ é a norma de um operador X no espaço de Hilbert-Schmidt. Essa medida indica a presença de emaranhamento em um dado estado não apenas no caso de sistemas $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$, mas no caso geral. Nesses dois casos particulares, a negatividade pode ser usada também para quantificar o emaranhamento, por caracterizá-lo nesses casos.

3.1.2 Quantificação de emaranhamento em sistemas bipartidos

O papel do emaranhamento como recurso para a computação e a informação quânticas torna a sua quantificação um passo importante para a realização de tarefas computacionais ou de protocolos de comunicação e criptografia, já que o sucesso na realização dessas tarefas pode depender da disponibilidade desse recurso. Isso torna importante a definição de ferramentas para se quantificar o emaranhamento em sistemas quânticos utilizados no processamento de informação quântica.

No caso de estados puros, como a pureza do estado de cada subsistema é diretamente relacionada à presença ou não de emaranhamento, essa quantidade pode ser utilizada na quantificação do emaranhamento. Essa quantificação é feita a partir da entropia de Von Neumann, definida para um estado ρ como $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho)$, e é uma medida ligada à ignorância sobre o estado de um sistema quântico. Para estados puros, temos $S(\rho) = 0$, enquanto para estados maximamente misturados temos $S(\mathbb{1}) = 1/d$, em que d é a dimensão do subsistema (para um q -bit, $d = 2$). A quantificação do emaranhamento para estados bipartidos é feita pela entropia de von Neumann calculada sobre a matriz densidade reduzida do sistema sobre uma das partes. No caso em que $S(\rho)$ é máxima, o estado é dito maximamente emaranhado. Essa quantidade é dita a entropia de emaranhamento, $SE(\rho)$, e foi introduzida por Bennet em [88].

Para estados mistos, a entropia de emaranhamento não é uma boa forma de se quantificar o emaranhamento. Isso se deve ao fato de que a matriz densidade reduzida pode apresentar entropia nula mesmo para estados emaranhados. Para esse tipo de estados, uma medida de emaranhamento E deve apresentar algumas propriedades básicas, que são:

- $E(\rho) = 0$ para qualquer estado separável ρ .
- O grau de emaranhamento de um estado ρ não pode aumentar por operações locais e comunicação clássica (Λ_{OLCC}), ou seja, $E(\rho) \geq E(\Lambda_{OLCC}(\rho))$.
- O emaranhamento de um estado puro maximamente emaranhado ρ de um sistema $d \otimes d$ deve ser dado por $E(\rho) = \log_2 d$.
- E deve ser uma função contínua do espaço de estado em \mathbb{R} .
- O emaranhamento de n cópias idênticas de ρ deve ser igual a n vezes o emaranhamento de uma cópia, ou seja: $E(\rho^{\otimes n}) = nE(\rho)$. Ou seja, E é aditiva.

- O emaranhamento do produto tensorial de dois estados não deve ser maior que a soma do emaranhamento de cada estado: $E(\rho_1 \otimes \rho_2) \leq E(\rho_1) + E(\rho_2)$.
- E deve ser uma função convexa, ou seja, $E(\lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2) \leq \lambda E(\rho_1) + (1 - \lambda)E(\rho_2)$.

Emaranhamento de formação. Essa medida de emaranhamento é definida a partir da ideia de que o grau de emaranhamento de um estado misto pode ser obtido como a média entre as entropias de emaranhamento de estados puros, que misturados formam o estado misto. Como um estado misto admite infinitas decomposições diferentes em termos de estados puros, e para diferentes decomposições essa média muda, o emaranhamento de formação (EF) de um estado ρ é definido como o mínimo sobre todas esas médias possíveis [89], ou seja

$$EF(\rho) = \min \sum_i p_i SE(\rho_i). \quad (3.6)$$

Para sistemas de dois q -bits, o emaranhamento de formação é dado analiticamente por [90]:

$$EF(\rho) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2(1 - x), \quad (3.7)$$

em que $x = (1 + \sqrt{1 - C^2})/2$. Nessa expressão, C é a concorrência, dada por $C = \max\{0, \lambda_1^{\frac{1}{2}} - \lambda_2^{\frac{1}{2}} - \lambda_3^{\frac{1}{2}} - \lambda_4^{\frac{1}{2}}\}$ e λ_i são os autovalores, em ordem decrescente, do operador $R = \rho(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$. Como o emaranhamento de formação é uma função monótona da concorrência, muitas vezes a própria concorrência é usada como medida de emaranhamento.

Para o caso geral de sistemas bipartidos, obter uma expressão analítica para o emaranhamento de formação é um problema difícil. Em sistemas com algum grau de simetria, como no caso dos estados de Werner, é possível obter uma expressão analítica [85, 91], como no caso simples de um sistema de dois q -bits. Nos casos em que não há expressão analítica, o emaranhamento de formação deve ser calculado numericamente [92–94].

3.1.3 Robustez generalizada e quantificação de emaranhamento em sistemas multipartidos

Uma outra classe de medidas de emaranhamento é baseada na possibilidade de se misturar dois estados, em uma combinação linear convexa, e se obter um terceiro estado. A robustez de emaranhamento [95] é definida como o mínimo que se adiciona de ruído separável σ a um estado ρ de forma que a combinação convexa seja um estado separável. Ou seja, a robustez de emaranhamento (RE) é definida como

$$\max_{s, \sigma_s} \{s\rho + (1 - s)\sigma_s\}, \quad (3.8)$$

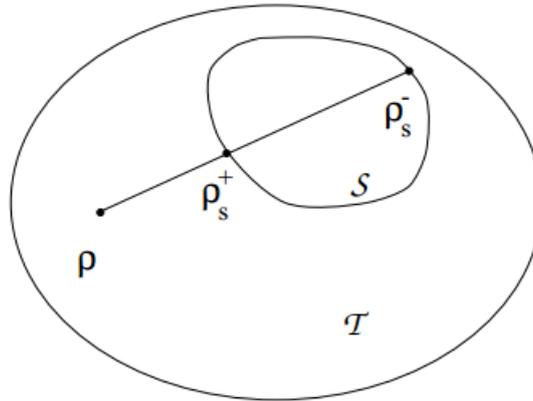


Figura 3.1: Uma mistura estatística ótima de um estado ρ com um estado separável σ , de forma que o estado resultante seja separável. O conjunto S é o conjunto dos estados separáveis, e T é o conjunto de todos os estados possíveis. O parâmetro ótimo de mistura, $s = 1/(1 + RE(\rho))$, é diretamente relacionado à robustez de emaranhamento. Original em [95].

em que $0 < s < 1$ e σ é a matriz densidade de um estado separável. Basicamente, a robustez de emaranhamento é relacionada a uma medida geométrica ótima que relaciona o estado ρ com o conjunto dos estados separáveis, S , com um peso máximo $s = 1/(1 + RE(\rho))$ em uma combinação convexa $\rho_S = s\rho + (1 - s)\sigma_s$, de forma que $\rho_S \in S$. Na Figura 3.1, o conceito é ilustrado geometricamente. Nessa Figura, a robustez de emaranhamento é relacionada diretamente ao comprimento do segmento de reta que liga o estado ρ ao conjunto dos estados separáveis S , do ponto ρ a ρ_s^+ .

Seguindo a mesma ideia da robustez de emaranhamento, podemos definir a robustez generalizada [96], a partir do mínimo possível de ruído σ que se mistura a um estado ρ , em uma combinação convexa $\rho_S = s\rho + (1 - s)\sigma$ que seja separável. O valor máximo de s tal que $\rho_S \in S$, é usado para definir a robustez generalizada (RG) [96], por:

$$RG(\rho) = \frac{1}{s - 1}. \quad (3.9)$$

Essa medida de emaranhamento não se restringe a sistemas bipartidos, podendo ser utilizada na quantificação de emaranhamento de sistemas multipartidos. Entretanto, pode ser calculada apenas numericamente, via métodos de otimização convexa, como programação semi-definida [94]. Ainda cabe comentar que a robustez generalizada determina o grau de emaranhamento, não o tipo de emaranhamento presente em sistemas multipartidos.

Alguns exemplos de aplicações da robustez generalizada podem ser encontradas em estudos ligados à transições de fase quântica em cadeias de spins e emaranhamento de ativação, ou seja, a quantidade de emaranhamento necessária para que um estado seja útil para o teleporte quântico, podem ser encontradas em [97–99].

A existência de várias classes de estados emaranhados dificulta a caracterização do emaranhamento em sistemas multipartidos. Por exemplo, em um sistema de três q -bits, os estados $|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle)$ e $|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle)$, são maximamente emaranhados mas possuem diferentes tipos de emaranhamento, não podendo ser levados um ao outro por OLCC. Enquanto o estado $|GHZ\rangle$ possui emaranhamento tripartido, o estado $|W\rangle$ possui emaranhamento entre os possíveis pares de q -bits. Isso torna medidas de emaranhamento ambíguas, no sentido de que apenas indicar o grau de emaranhamento de um estado não caracteriza o emaranhamento completamente. Nesse tipo de sistemas, diferentes classes de emaranhamento tem seu emaranhamento quantificado por diferentes medidas de emaranhamento, que indicam não apenas o grau de emaranhamento, mas também à qual classe de emaranhamento o estado é relacionado. Isso não ocorre com a robustez generalizada, que indica apenas o grau de emaranhamento de um estado. Já o *tangle* [85] é uma medida que quantifica apenas o emaranhamento genuinamente tripartido, sendo máximo para o estado $|GHZ\rangle$ e nulo para o estado $|W\rangle$.

Em resumo, sistemas multipartidos possuem uma estrutura muito mais rica e complicada de emaranhamento. É razoável que apenas uma única quantidade escalar não seja suficiente para caracterizar o emaranhamento multipartido. Uma revisão mais completa sobre medidas de emaranhamento multipartido pode ser encontrada em [84, 85].

3.2 Relação entre emaranhamento e estados pseudo-puros

Na Seção 2.4, do Capítulo 2, foram introduzidos os estados pseudo-puros e como são preparados esses estados em sistemas de amostras líquidas. Como vimos, esses estados são misturas estatísticas da forma

$$\rho = \frac{1 - \epsilon}{2^N} \mathbf{1} + \epsilon |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (3.10)$$

no qual ϵ é a polarização do estado, N é o número de q -bits e $|\psi\rangle$ é um estado puro. A pureza desses estados é diretamente ligada à polarização do estado, e é dada pela expressão $Tr(\rho^2) = \frac{1 - \epsilon^2}{2^N} + \epsilon^2$. Como o valor típico de ϵ para sistemas com poucos q -bits é da ordem de 10^{-5} , esse estado é altamente misturado. Nesse tipo de estados, temos infinitas decomposições da matriz densidade em termos de combinações lineares convexas de estados puros, o que torna difícil a quantificação de emaranhamento nesse tipo de estado, como vimos na última Seção. Devido à forma dos estados pseudo-puros, o emaranhamento de $|\psi\rangle$ é dito pseudo-emaranhamento.

3.2.1 Separabilidade dos estados pseudo-puros

Se aplicarmos o critério de Peres-Horodecki ao estado pseudo-puro de dois q -bits $\rho = \frac{1-\epsilon}{4}\mathbb{1} + \epsilon|\phi^+\rangle\langle\phi^+|$, os autovalores da transposta parcial desse estado são dados por $\{(1+\epsilon)/4, (1-3\epsilon)/4\}$, sendo que o autovalor $(1+\epsilon)/4$ possui multiplicidade 3. Usando esse critério, o valor mínimo de ϵ para que o estado ρ não seja separável é dado por $\epsilon > 1/3$. Como a temperatura ambiente temos $\epsilon \approx 10^{-5}$, o estado pseudo-puro, mesmo com a parte pura dada por um estado maximamente emaranhado, é separável.

O critério de Peres-Horodecki é necessário e suficiente apenas para sistemas de dois q -bits (ou sistemas de um q -bit e um q -trit), o que implica que uma análise mais detalhada da separabilidade dos estados pseudo-puros em sistemas de mais q -bits deve ser feita de uma outra forma. Em 1999, Braunstein e seus colaboradores [100] obtiveram um limite superior de ϵ para a separabilidade dos estados pseudo-puros, assim como um limite inferior para que esses estados sejam emaranhados. Esses limites, no caso de sistemas de N q -bits, são dados por

$$\epsilon \leq \frac{1}{1 + 2^{2N-1}}, \quad (3.11)$$

para o limite superior de separabilidade dos estados pseudo-puros, e

$$\epsilon > \frac{1}{1 + 2^{\frac{N}{2}}}, \quad (3.12)$$

como limite inferior para que os estados pseudo-puros não sejam separáveis. Na região entre esses dois valores, não é possível determinar se encontra-se emaranhamento ou não em um estado pseudo-puro. Como é óbvio, no caso em que $N = 2$, o valor de ϵ encontra-se na região separável. Para experimentos de RMN a temperatura ambiente, mesmo com o máximo já realizado experimentalmente de 12 q -bits [101], o valor de ϵ é tal que não se alcança o limite inferior para garantir o emaranhamento do estado pseudo-puro. No entanto, nesse caso já se tem um valor de ϵ que deixa a região de separabilidade dos estados pseudo-puros.

É importante enfatizar que a separabilidade dos estados pseudo-puros a temperatura ambiente não impossibilita a RMN de implementar computação quântica. Como a RMN produz a dinâmica correta, é sempre possível implementar algoritmos e protocolos quânticos utilizando estados pseudo-puros, já que a dinâmica é a mesma de um estado puro. O ponto crucial, apontado por Linden e Popescu [102], é que a separabilidade dos estados pseudo-puros não proporciona ganho exponencial de velocidade de processamento. Considere que a implementação de um dado algoritmo quântico via RMN resulta no estado:

$$\rho = \frac{1-\epsilon}{2^N}\mathbb{1} + \epsilon|\rho_f\rangle\langle\rho_f|,$$

em que $|\psi_f\rangle$ representa a solução de um problema computacional. Neste estado, temos uma probabilidade ϵ de encontrar o sistema no estado que representa a solução e uma probabilidade $(1 - \epsilon)$ de encontrar o sistema em um outro estado qualquer. Como ϵ é proporcional a $1/2^N$, a medida que N aumenta, a probabilidade de encontrar a solução diminui exponencialmente. Assim, a solução fica sob um ruído enorme, sendo preciso repetir a computação m número exponencial de vezes para que a solução possa ser encontrada. Linden e Popescu [102] mostraram que se o estado pseudo puro for separável, o número de repetições necessárias escala exponencialmente.

3.2.2 Modelo de variáveis ocultas locais para RMN

Como em experimentos de líquidos não temos emaranhamento a temperatura ambiente, o estado individual de cada spin em um amostra líquida pode ser descrito por um modelo de variáveis ocultas locais. No entanto, para que um experimento seja descrito por um modelo de variáveis ocultas locais, não apenas o estado dos spins deve ser descrito pelo modelo, mas também as dinâmicas unitária e não-unitária às quais os spins da amostra estão sujeitos. Uma primeira tentativa de descrição dos experimentos de RMN se deve a Caves e Schack [103], mas com aplicação apenas na descrição dos estados pseudo-puros. Nessa Subseção discutiremos brevemente o modelo proposto por Menicuci e Caves para a descrição tanto do estado quanto da evolução dos spins nos experimentos de RMN com líquidos [104].

A ideia central do modelo de Menicuci e Caves é a possibilidade de se descrever os estados de um sistema quântico através de uma quase-distribuição de probabilidades, $w_\rho(\tilde{n})$ ligada a um conjunto de direções na esfera de Bloch, dado por vetores n_j . Se o estado é separável, como é o caso para sistemas de até 12 q -bits, essa quase-distribuição é não-negativa e passa a descrever a matriz densidade de um sistema de N spins como o produto de N matrizes densidade de spins com orientações bem definidas, dadas pelos vetores n_j . Ou seja, o estado é dado na forma

$$\rho = \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) |\tilde{n}\rangle \langle \tilde{n}|, \quad (3.13)$$

em que $|\tilde{n}\rangle \langle \tilde{n}| = |\vec{n}_1\rangle \langle \vec{n}_1| \otimes |\vec{n}_2\rangle \langle \vec{n}_2| \otimes \dots \otimes |\vec{n}_N\rangle \langle \vec{n}_N|$, e $|\vec{n}\rangle \langle \vec{n}| = (\mathbf{1} + (\vec{n}, \vec{\sigma})/2)$. A probabilidade de se encontrar o sistema em uma configuração $\tilde{n} = (\vec{n}_1, \vec{n}_2, \dots, \vec{n}_N)$ é dada por $w_\rho(\tilde{n})$. Então, o modelo basicamente trata da dinâmica dessas probabilidades, que é diretamente associada com a dinâmica do sistema quântico. Um ponto importante é que a equação acima só é uma matriz densidade se temos $w_\rho(\tilde{n}) \geq 0$ para todos os \tilde{n} , ou seja, se o estado for emaranhado o modelo de Menicuci e Caves não é válido.

A atuação de elementos de operação E_k sobre o estado dado em (3.13) tem como resultado

o estado

$$\rho' = \sum_{\tilde{n}'} w_{\rho'}(\tilde{n}') |\tilde{n}'\rangle \langle \tilde{n}'| = E_k \rho E_k^\dagger, \quad (3.14)$$

e as distribuições $w_\rho(\tilde{n})$ tem a evolução dada por

$$w_{\rho'} = \sum_{\tilde{n}} T_{\tilde{n}', \tilde{n}}^{E_k} w_\rho(\tilde{n}). \quad (3.15)$$

Nessa equação temos $T^{E_k} = \langle \tilde{n} | E_k Q(\tilde{n}') E_k^\dagger | \tilde{n} \rangle$, em que $Q(\tilde{n}) = \frac{1}{N^N} (\mathbf{1} + 3(\vec{n}_1, \vec{\sigma})) \otimes (\mathbf{1} + 3(\vec{n}_2, \vec{\sigma})) \otimes \dots \otimes (\mathbf{1} + 3(\vec{n}_N, \vec{\sigma}))$.

Em termos de $w_\rho(\tilde{n})$, os valores esperados dos observáveis de RMN, $\langle (\vec{a}_1, \vec{\sigma}) \otimes (\vec{a}_2, \vec{\sigma}) \otimes \dots \otimes (\vec{a}_N, \vec{\sigma}) \rangle$, são dados por

$$C(\vec{a}) = \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) (\vec{a}_1, \vec{n}_1) (\vec{a}_2, \vec{n}_2) \dots (\vec{a}_N, \vec{n}_N), \quad (3.16)$$

nessa equação, os \vec{a}_i 's definem as componentes de magnetização medidas para cada um dos spins.

Para descrevermos a dinâmica, precisaremos de um conjunto de variáveis ocultas, λ , dado por um vetor \vec{w} com componentes $w_\rho(\tilde{n})$, as direções \tilde{n} e um conjunto de N variáveis Λ_r . As variáveis Λ_r satisfazem, por definição, as relações

$$A(\vec{a}_r, \Lambda_r, \tilde{n}) = \begin{cases} +1, & \text{se } -(\vec{a}_r, \vec{n}_r) \geq 1 \\ -1, & \text{se } -(\vec{a}_r, \vec{n}_r) < 1 \end{cases}. \quad (3.17)$$

A distribuição de probabilidades das variáveis ocultas é dada por

$$P(\lambda) = \frac{1}{2^N} \delta(\vec{w} - \vec{w}_\rho) w(\tilde{n}). \quad (3.18)$$

Após uma evolução temporal, a distribuição $P(\lambda)$ evolui para uma distribuição $P(\lambda')$, relacionada com a primeira por

$$P(\lambda') = \int d\lambda T(\lambda', \lambda) P(\lambda), \quad (3.19)$$

na qual $T(\lambda', \lambda)$ é uma transição de probabilidade devido à evolução do sistema e deve ser positiva. Descrevendo a evolução por operadores de Krauss, o vetor \vec{w} é atualizado pela transformação dada em (3.15). Na eq. (3.18), a função delta não muda o valor de \vec{w} que resulta da

aplicação de (3.15). No entanto, pode se mostrar que a distribuição de probabilidade dada por (3.18) implica sempre em uma transição de probabilidade positiva [105].

O valor esperado de uma medida de magnetização, $C(\vec{a})$ é dado por esse modelo como

$$\begin{aligned}
C(\vec{a}) &= \int d\lambda P(\lambda) \prod_j^N A_j(\vec{a}_j, \lambda) \\
&= \sum_{\vec{n}} \int d\tilde{\Lambda} \int dw \frac{1}{2^N} \delta(\vec{w} - \vec{w}_\rho) w(\vec{n}) \prod_j^N A_j(\vec{a}_j, \Lambda_j, \vec{n}_j) \\
&= \sum_{\vec{n}} w_\rho(\vec{n}) \prod_j^N \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\tilde{\Lambda} A_j(\vec{a}_j, \Lambda_j, \vec{n}_j) \\
&= \sum_{\vec{n}} w_\rho(\vec{n}) \prod_j^N (\vec{a}_j, \vec{n}_j). \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Esse modelo fornece a estatística correta de uma medida, a descrição dos estados e a evolução do sistema. Ou seja, reproduz os resultados da mecânica quântica. O modelo é local, pois o resultado da medida sobre o spin r não depende de nenhum parâmetro relacionado a outro spin, e é realístico, pois cada spin pode ser visto como um pequeno ímã clássico com o momento magnético orientado em uma direção bem definida.

É importante ressaltar que o modelo de Menicucci e Caves não é um modelo computacionalmente eficiente, já que o número de variáveis ocultas cresce de forma exponencial com o tamanho do sistema. Logo, apesar de um sistema de RMN a temperatura ambiente não apresentar nenhum grau de emaranhamento, a dinâmica do sistema é quântica, já que não pode ser simulada eficientemente em um computador clássico. Esse fato corrobora com a argumentação de que o poder da computação quântica é relacionado à dinâmica do sistema [106].

Adiante, na Seção 6.2, é mostrado que a versão quântica do experimento de escolha retardada não pode ser explicado em termos clássicos mesmo na presença de altos níveis de ruído branco, ou seja, em casos que a polarização do estado pseudo-puro é muito baixa, como no caso de líquidos. No entanto, nesse experimento as variáveis ocultas são ligadas ao comportamento ondulatório ou corpuscular de sistemas quânticos, e não à orientação dos spins do sistema. Os elementos de realidade nos dois problemas são diferentes, seguindo a linguagem usada no artigo de Einstein, Podolski e Rosen [2].

3.2.3 Experimentos de RMN com pseudo-emaranhamento

Apesar de experimentos de RMN com líquidos a temperatura ambiente não apresentarem emaranhamento entre os q -bits, vários experimentos de computação e informação quânticas, envolvendo emaranhamento, foram realizados com sucesso através da técnica, como o teleporte

quântico [81], o protocolo de codificação superdensa [107] e análogo de RMN para testes de violação de desigualdade de Bell [8] (veja a Seção adiante). A implementação desses protocolos mostra como as ferramentas de RMN podem ser úteis no desenvolvimento de técnicas de controle e de protocolos que ajudem na implementação prática de computadores quânticos, além de ter papel relevante como plataforma para vários testes de fundamentos da mecânica quântica, por exemplo, testando o princípio de complementaridade [27, 28] e simulações de violações de desigualdades de Bell [8] (veja a próxima Seção).

Teleporte quântico

Uma das aplicações mais emblemáticas do emaranhamento é o teleporte quântico, que trata da transmissão da informação contida no estado de um q -bit para um outro q -bit, sem a transmissão física do q -bit que tem a informação inicial [10]. O protocolo consiste de um conjunto de três q -bits (veja a Figura 3.2, inicialmente no estado $|\psi\rangle \otimes |\phi^+\rangle$, com $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$). Esse conjunto de q -bits é sujeito a uma medida na base de Bell sobre os q -bits que estão com Maria, como indicado na Figura. Os resultados dessa medida são relacionados aos seguintes estados no q -bit alvo, em posse de João:

$$\begin{aligned} 00 &\rightarrow \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \\ 01 &\rightarrow \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle, \\ 10 &\rightarrow \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle, \\ 11 &\rightarrow \alpha|1\rangle - \beta|0\rangle. \end{aligned}$$

Para que o teleporte seja completado, Maria deve necessariamente usar um canal clássico para transmitir o resultado da medida sobre os q -bits para João. O teleporte é completado com João atuando portas X e Z , condicionadas ao resultado da medida feita por Maria sobre os q -bits. Assim, o estado inicial do primeiro q -bit, com Maria, é enviado para o q -bit que está com João.

Essa proposta foi realizada experimentalmente primeiro via ótica quântica, mas sem a parte relacionada à comunicação clássica [108]. A primeira implementação experimental completa desse protocolo foi realizada utilizando a RMN [41]. Nielsen, Knill e Laflamme utilizaram como q -bits os dois núcleos de ^{13}C e o núcleo de ^1H de uma molécula de trocloretileno. O q -bit que tem seu estado teleportado é o spin de um dos núcleos de ^{13}C , e o alvo é o spin do ^1H . Nessa implementação, foi utilizada a equivalência entre a descoerência e a realização de uma medida projetiva sobre o sistema [80] (veja a Subseção 2.5.4 do Capítulo anterior), já que os tempos de descoerência do carbono são menores que o do hidrogênio por uma ordem de grandeza

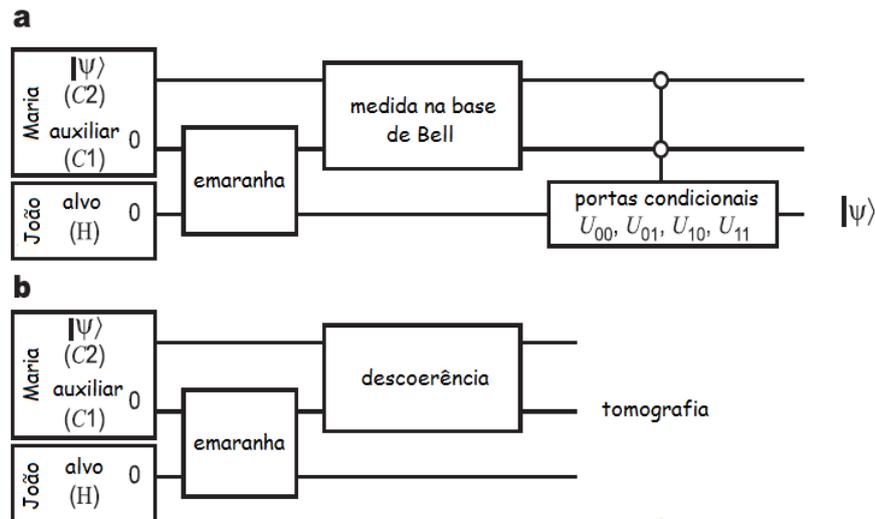


Figura 3.2: (a) Circuito quântico para o protocolo de teleporte quântico. Os q -bits são inicializados no estado $|\psi\rangle \otimes |00\rangle$, com $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. (b) Circuito com as operações realizadas para a implementação do teleporte via RMN. Retirado de [36].

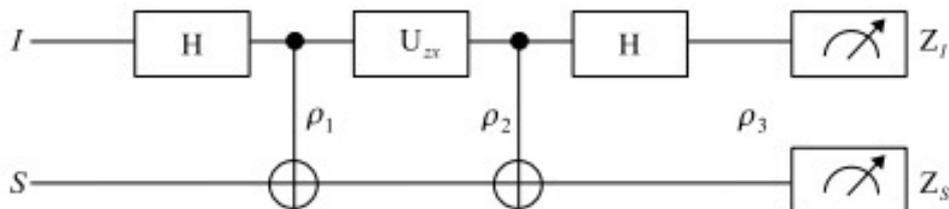


Figura 3.3: Circuito quântico para o protocolo de codificação superdensa. Na primeira parte do circuito, o estado de entrada $|00\rangle$ é transformado no estado do gato, $|\Phi^+\rangle$. Após, o operador de "mensagem" é aplicado, levando $|\Phi^+\rangle$ em um dos quatro estados da base de Bell. A parte final do circuito indica a medida na base de Bell.

na amostra utilizada. Dessa forma, os dois carbonos perdem toda a coerência enquanto a coerência do hidrogênio ainda é mantida. Com o estado dos spins nucleares dos carbonos como bits clássicos, já que a medida projetiva deixa esses dois spins em um dos estados da base computacional (00, 01, 10 ou 11), as operações condicionais do canal clássico são realizadas, completando a implementação do teleporte. O esquema da realização experimental é dado na Figura 3.2(b).

Codificação superdensa

A codificação superdensa consiste no envio de dois bits de informação clássica pelo envio de apenas um q -bit e foi proposta por Bennet *et al.* [109]. A ideia central é que Maria e João tenham um q -bit de um par emaranhado no estado $|\phi^+\rangle$. Maria então aplica uma operação

dependendo da mensagem que deseja enviar a João, que consiste na aplicação ou não das portas X e Z sobre o q -bit que se encontra com ela. Essas operações mapeiam o estado $|\phi^+\rangle$ nos outros estados da base de Bell,

$$\begin{aligned} |\phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = |\phi^+\rangle, \\ Z|\phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) = |\phi^-\rangle, \\ X|\phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle) = |\psi^+\rangle, \\ XZ|\phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle) = |\psi^-\rangle. \end{aligned}$$

O protocolo é completado com Maria enviando seu q -bit para João. Em seguida, João faz uma medida na base de Bell sobre os dois q -bits, obtendo um dos resultados: 00, 01, 10 ou 11. Esses dois bits clássicos de informação, resultantes da medida feita por João, foram obtidos pelo envio de apenas do q -bit inicialmente com Maria.

Esse protocolo foi experimentalmente realizado em RMN por Fang *et al* [107], em uma molécula de clorofórmio. Nessa implementação, o controle sobre o resultado final é obtido por meio da realização de uma tomografia de estado ao final do circuito, confirmando o controle no envio da mensagem pela aplicação das portas locais X e Z .

3.3 Análogo de RMN para testes de violação de desigualdades de Bell

Experimentos nos quais o emaranhamento possui papel crucial são os testes de violação de desigualdades de Bell, que tratam do aspecto não-local da mecânica quântica e podem ser formulados para sistemas de N q -bits [110–112]. Esses testes consistem da medição de funções de correlação nos resultados das medidas de M observáveis dicotômicos⁴, feitas por cada observador em um conjunto de N observadores. As M^N funções de correlação, $E(n_1, \dots, n_N)$, que podem ser construídas nesse caso podem ser combinadas linearmente de diferentes formas e comparadas com limites impostos pela hipótese de realismo local, com as previsões da mecânica quântica exibindo contradições com modelos de variáveis ocultas locais. Uma expressão geral para as desigualdades de Bell é dada por

$$-L \leq \sum_{n_1, \dots, n_N=1}^M C(n_1, \dots, n_N) E(n_1, \dots, n_N) \leq +L. \quad (3.21)$$

⁴Observáveis dicotômicos são observáveis que podem apresentar apenas dois resultados distintos: $s = \pm 1$.

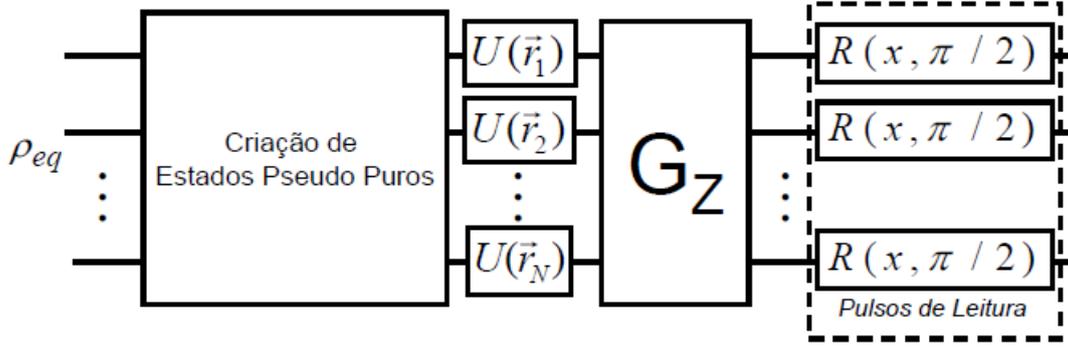


Figura 3.4: Circuito para o cálculo da função de correlação dada por (3.23). Retirado e adaptado de [8].

Nessa equação, $C(n_1, \dots, n_N)$ são coeficientes reais e L é o limite imposto pela hipótese de realismo local. Cada uma das funções de correlação pode ser escrita na forma

$$E(n_1, \dots, n_N) = \sum_{s_1, \dots, s_N = \pm 1} \left(\prod_{s_j}^{s_j} \right) P(s_1, \dots, s_N), \quad (3.22)$$

em que $P(n_1, \dots, n_N)$ são as probabilidades de cada observador j obter o resultado s_j . O sistema é então preparado em um estado puro e emaranhado, e as M componentes de spin são medidas por observadores diferentes, que comparam seus resultados a fim de obter as funções de correlação $E(n_1, \dots, n_N)$ e verificar se a desigualdade (3.21) foi violada ou não.

Uma proposta de um análogo da realização desses testes usando RMN foi apresentada e realizada em [8]. No caso de RMN, os observáveis são as projeções de N spins $1/2$ ao longo de direções dadas por \vec{r} . Para se medir as projeções $(\vec{r}, \vec{\sigma})$ de um spin I^j ao longo de uma direção arbitrária $\vec{r} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$, transformações locais unitárias são aplicadas sobre o spin de forma que os autovetores de $(\vec{r}, \vec{\sigma})$ sejam girados para a base computacional. Como $U(\vec{r})\sigma_z U(\vec{r}) = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ e $U(\vec{r}) = R_y(\theta)R_z(\phi)$, aplicando uma $U(\vec{r})$ adequada a cada spin temos as funções de correlação dadas por

$$\begin{aligned} E(n_1, \dots, n_N) &= \text{Tr}(\rho \vec{r}_1 \cdot \vec{\sigma} \otimes \dots \otimes \vec{r}_N \cdot \vec{\sigma}) \\ &= \text{Tr}(\rho' \sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_z), \end{aligned} \quad (3.23)$$

em que ρ é o estado inicial do sistema de spins e $\rho' = U(\vec{r}_1) \otimes \dots \otimes U(\vec{r}_N) \rho U^\dagger(\vec{r}_1) \otimes \dots \otimes U^\dagger(\vec{r}_N)$. A medida projetiva na base computacional sobre todos os spins, em sistemas heteronucleares, pode ser emulada pela aplicação de um gradiente de campo na direção z . O resultado dessa operação é uma matriz diagonal, com os elementos dados pelas probabilidades em (3.22). Essas probabilidades podem ser acessadas experimentalmente pela aplicação de pulsos $R_x(\frac{\pi}{2})$ em cada

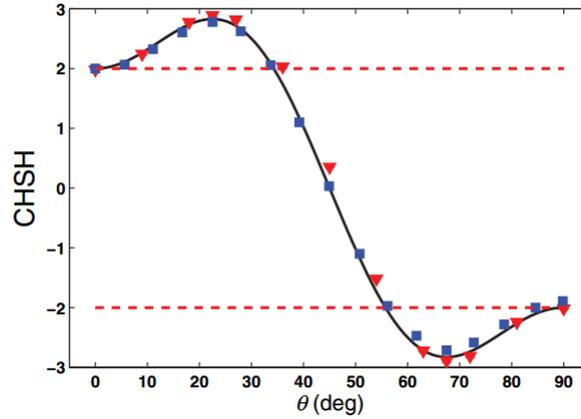


Figura 3.5: Resultados experimentais para o estado $|\phi^+\rangle$. \blacktriangledown indicam os resultados de RMN, enquanto \blacksquare indicam os resultados de ótica em [113]. A linha sólida é a previsão da mecânica quântica. Retirado de [8].

um dos spins. Esse procedimento pode ser descrito pelo circuito dado na Figura 3.4.

Essa proposta foi realizada experimentalmente em uma amostra de clorofórmio (veja 2.6). Nesse sistema, é simulada a violação da desigualdade CHSH [4], um caso especial de (3.21). A desigualdade $CHSH$ é dada por

$$-2 \leq CHSH = E(n_1, n_2) + E(n_3, n_2) + E(n_3, n_4) + E(n_1, n_4) \leq +2, \quad (3.24)$$

e o limite para a mecânica quântica é dado por $\pm 2\sqrt{2}$. Para as direções dadas por $\vec{n}_1 = (0, 0, 1)$, $\vec{n}_2 = (\sin 2\theta, 0, \cos 2\theta)$, $\vec{n}_3 = (\sin 4\theta, 0, \cos 4\theta)$ e $\vec{n}_4 = (\sin 6\theta, 0, \cos 6\theta)$, os valores preditos pela mecânica quântica para $CHSH$ são dados por $CHSH = 3 \cos 2\theta - \cos 6\theta$ para o estado puro $|\phi^+\rangle$. A comparação dessa com os resultados experimentais pode ser vista na Figura 3.5, em que também são mostrados os resultados experimentais do experimento realizado com ótica, dado em [113].

Apesar do excelente acordo entre os resultados experimentais e a previsão da mecânica quântica, como mostrado nas seções anteriores 3.2.1 e 3.2.2, os experimentos de RMN não possuem emaranhamento e podem ser descritos por um modelo de variáveis ocultas locais em que a orientação dos spins é sempre bem definida. Logo, a aparente violação da desigualdade de Bell é apenas uma simulação, e não um experimento para testar a hipótese de realismo local, como pode ser visto pelo excelente acordo entre os dados e a previsão do modelo de variáveis ocultas locais exibido na Figura 3.6. Mesmo se tratando de uma simulação, esses testes com RMN podem ser úteis em vários outros casos, por exemplo, em que o aparato experimental, como os experimentos de ótica ou de outras técnicas, se tornam muito complicados.

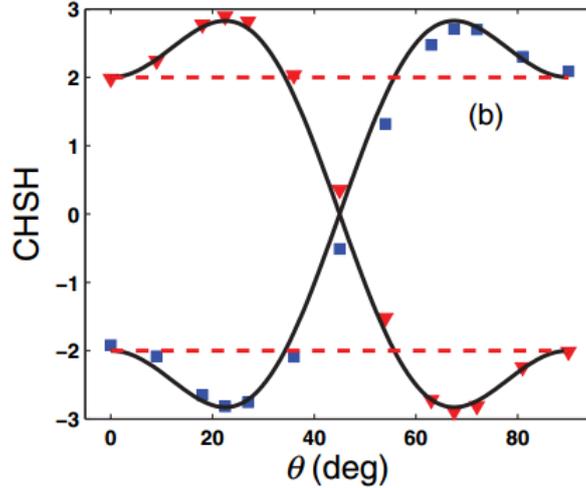


Figura 3.6: Resultados experimentais para os estados $|\phi^+\rangle$ (\blacktriangledown) e $|\psi^-\rangle$ (\blacksquare). A linha sólida é a previsão do modelo de variáveis ocultas de Menicucci e Caves. Retirado de [8].

3.4 Testemunhas de emaranhamento

Apesar de o emaranhamento ser apontado como uma das principais ferramentas nos campos da computação e informação quânticas, tanto sua detecção quanto sua quantificação são um problema de alta complexidade [117]. Além disso, as medidas de emaranhamento como o emaranhamento de formação e a robustez generalizada demandam um alto custo experimental, já que elas são definidas a partir de informação sobre o estado completo do sistema, demandando a realização de uma tomografia de estado sobre o sistema. Como discutido na Seção 2.5, a tomografia de estado quântico necessita de um número de experimentos que cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Esse alto custo experimental faz com que seja desejável o desenvolvimento de ferramentas para a detecção de quantificação de emaranhamento com o uso de poucas medidas. Nesse sentido, foram desenvolvidas as testemunhas de emaranhamento.

Uma testemunha de emaranhamento é um observável, W , tal que $Tr(\rho W) \geq 0$, para qualquer estado $\rho \in S$, em que S é o conjunto dos estados separáveis, e $Tr(\rho' W) < 0$ para pelo menos um estado emaranhado ρ' [20, 85]. As testemunhas de emaranhamento podem ser utilizadas tanto para a detecção de emaranhamento em um dado estado, quanto para se quantificar o emaranhamento para um estado específico ou uma classe de estados [20, 94]. A principal vantagem no uso das testemunhas de emaranhamento é a possibilidade da detecção de emaranhamento sem a necessidade de se fazer a tomografia de estado quântico do sistema, reduzindo de forma significativa o número de medições. As testemunhas de emaranhamento são diretamente relacionadas às desigualdades de Bell, de forma que para toda desigualdade de Bell existe uma testemunha de emaranhamento associada [19, 114]. Essa relação tem origem na necessidade de emaranhamento para que ocorra a violação de uma desigualdade de Bell.

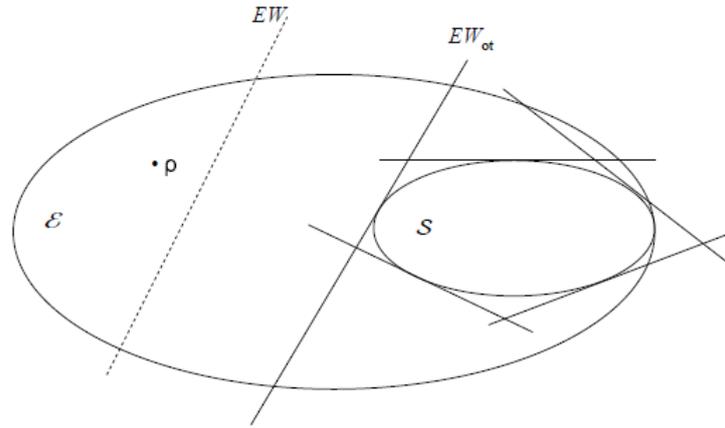


Figura 3.7: Interpretação geométrica das testemunhas de emaranhamento EW e EW_{ot} , que é uma otimização de EW .

Um exemplo interessante de utilização das testemunhas de emaranhamento é na caracterização de emaranhamento em sistemas térmicos, através da definição de testemunhas de emaranhamento a partir de observáveis termodinâmicos [115, 116], como a susceptibilidade magnética, por exemplo.

É possível dar uma interpretação geométrica simples para as testemunhas de emaranhamento. Dado o conjunto de todas as matrizes densidade, com E e S os subconjuntos dos estados emaranhados e separáveis, uma testemunha de emaranhamento W é interpretada como o operador que define um plano que separa um dado estado emaranhado do conjunto de estados separáveis (veja a Figura 3.7).

As propriedades mais básicas das testemunhas de emaranhamento são diretamente ligadas ao fato de o conjunto dos estados separáveis ser um conjunto convexo (a mistura de dois estados separáveis é um estado separável) e à estrutura geométrica do espaço de Hilbert-Schmidt [84, 85]. A propriedade mais simples é a de que, para qualquer estado emaranhado ρ , sempre é possível se definir uma testemunha W tal que $tr(\rho W) < 0$. Esse fato permite a detecção de emaranhamento de qualquer estado quântico a partir da medida direta de observáveis, sem a necessidade de fazer a tomografia de estado. De um ponto de vista experimental, talvez esse seja um dos resultados mais importantes ligados às testemunhas de emaranhamento. Além disso, a existência de testemunhas de emaranhamento para qualquer estado emaranhado é um fato equivalente à própria definição de emaranhamento.

Uma outra propriedade importante das testemunhas de emaranhamento é a possibilidade de se comparar a detecção de emaranhamento de duas testemunhas de emaranhamento distintas, com relação a um estado ou a uma classe de estados. Para tal, fazemos a seguinte definição: uma testemunha de emaranhamento W é dita mais fina que uma testemunha W' se o conjunto I_W , dado por todos os ρ tais que $tr(\rho W) < 0$ (ou seja, o conjunto dos estados emaranhados

detectados por W), contém o conjunto $I_{W'}$. Um resultado importante relacionando duas testemunhas W e W' , tais que W seja mais fina que W' , é que a testemunha W pode ser obtida a partir de W' pela subtração de um operador positivo [20]. Se não for possível extrair um operador positivo de uma testemunha W , então W é dita uma testemunha ótima. Geometricamente, uma testemunha ótima W_{ot} pode ser obtida promovendo-se o transporte paralelo do plano de forma ao mesmo se tornar tangente ao conjunto de estados separáveis (veja a Figura 3.7).

Um ponto que deve ser comentado é que a detecção dos estados emaranhados com transposta parcial não-negativa, ou estados de emaranhamento preso, só pode ser feita a partir do uso das testemunhas de emaranhamento não-decomponíveis, que são testemunhas de emaranhamento que não podem ser escritas na forma

$$W = aP + (1 - a)Q^T, \quad (3.25)$$

em que $a \in [0, 1]$. P é um operador positivo e Q um operador não-negativo. Esses estados de emaranhamento preso são os estados na borda da região limitada pelo conjunto dos estados separáveis na Figura 3.7.

3.4.1 Otimização de testemunhas e PSD

Apesar de existir a possibilidade de se definir, ou mesmo otimizar, uma testemunha de emaranhamento para detectar um estado ρ ou uma classe de estados, a definição de uma testemunha de emaranhamento é uma tarefa complicada, assim como a sua otimização. Tratando esse problema de um ponto de vista computacional, a definição de uma testemunha de emaranhamento para um estado ρ é um problema da classe NP -duro, assim como a fatoração em números primos [117].

Um critério de separabilidade necessário e suficiente, no regime assintótico, foi proposto por Brandão e Viana [94]. Esse método faz uso de programação semi-definida (PSD), que pode ser eficientemente executada em computadores clássicos. Basicamente, a ideia é se obter um operador W que minimize um funcional linear definido com relação a um estado ρ , sob a condição de ser não-negativo para todos os estados separáveis. Basicamente, a testemunha de emaranhamento W , ótima com relação ao estado $\rho_{(1\dots n)}$, em um espaço de Hilbert-Schmidt $H_1 \otimes \dots \otimes H_{n-1}$ é obtida como a solução do seguinte $PSDR$, ou programa semi-definido robusto:

minimize $Tr(W\rho_{1\dots n})$ sujeito a

$$\sum_{i_1=1}^{d_n} \sum_{j_1=1}^{d_n} \dots \sum_{i_{n-1}=1}^{d_n} \sum_{j_{n-1}=1}^{d_n} (a_{i_1}^* \dots a_{i_{n-1}}^* a_{j_1} \dots a_{j_{n-1}}) \quad (3.26)$$

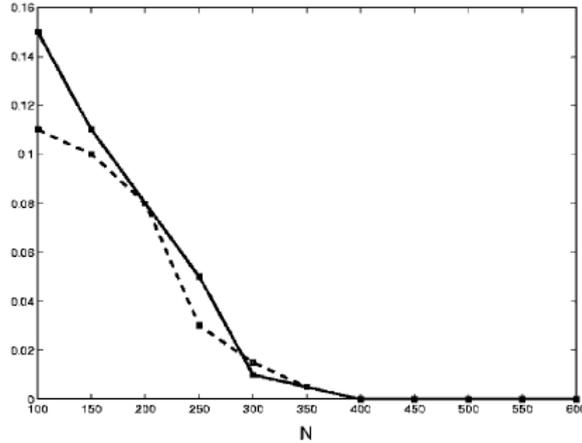


Figura 3.8: Porcentagem de resultados errados com o tamanho da amostragem (N), para sistemas $2 \otimes 2$ (linha pontilhada) e $2 \otimes 3$ (linha sólida). Original em [94].

$$W_{i_1 \dots i_{n-1} j_1 \dots j_{n-1}} \geq 0$$

$$Tr(W) = 1, \quad \forall a_{i_k} \in \mathcal{C}, \quad 1 \leq k \leq n-1$$

em que d_n é a dimensão de H_n , $W_{i_1 \dots i_{n-1} j_1 \dots j_{n-1}} = {}_1 \langle i | \otimes \dots \otimes {}_{n-1} \langle i | W | j \rangle_{n-1} \otimes \dots \otimes | j \rangle_1$ e $| j \rangle_k$ é uma base ortonormal de H_k .

Em geral *PSDR's* da forma acima são problemas de otimização que não são tratáveis em um computador clássico, sendo da classe de complexidade *NP-duro* [118]. No entanto, esse problema pode ser relaxado e tratado de forma determinística ou probabilística, sendo mapeado em um programa semi-definido (*PSD*), que é eficientemente resolvido em um computador clássico.

A relaxação desse problema é feita tratando-se a definição da testemunha de emaranhamento de forma probabilística, definindo um conjunto de N amostras a_{i_j} , que determina *a priori* a probabilidade de um estado qualquer ser emaranhado ou não. À medida que N aumenta, a probabilidade de acerto sobre a separabilidade ou não do estado aumenta de forma a tender à unidade para N suficientemente grande [94]. Dessa forma, o *PSD* definido a partir da relaxação do *PSDR* dado em (3.26) fornece um critério de separabilidade suficiente no caso geral e assintoticamente necessário. Ou seja, pode-se determinar com precisão e probabilidade arbitrárias, se um estado qualquer é separável ou não. A porcentagem de conclusões erradas sobre a separabilidade, para o caso de um sistema $2 \otimes 2$ ou $2 \otimes 3$, de um estado com o número de amostras usado no *PSD* é mostrado na Figura 3.8. Fica claro na Figura que, para $N > 500$, a porcentagem de conclusões erradas é quase nula.

Capítulo 4

Resultado I: implementação de uma testemunha de emaranhamento de RMN

Nesse Capítulo trataremos do primeiro resultado dessa tese, ligado à detecção do pseudo-emaranhamento em estados pseudo-puros [32]. Nesse trabalho, foi feita uma análise experimental da detecção de pseudo-emaranhamento em um sistema de dois q -bits, dados pelos spins dos núcleos de 1H e ^{13}C na molécula de clorofórmio, por uma testemunha de emaranhamento definida a partir do protocolo de codificação superdensa, proposta em [119]. A detecção de pseudo-emaranhamento por essa testemunha é analisada para os estados Bell-diagonais. Além disso, definimos testemunhas de emaranhamento W , ótimas para os estados Bell-diagonal, a partir do método de otimização da Seção 3.4.1 para cada um dos estados de Bell. Por fim, a detecção de pseudo-emaranhamento por F e W na relaxação do estado $|\phi^-\rangle$ é comparada.

4.1 Teoria

Recentemente, uma proposta para uma testemunha de emaranhamento foi feita no contexto do processamento de informação quântica por RMN [119] a partir do protocolo de codificação superdensa, que foi implementado com sucesso em RMN por [107] (veja a Seção 3.2.3 do Capítulo anterior). O circuito para a codificação superdensa é dado na Figura 4.1. Para um estado puro o circuito transmite dois bits de informação clássica com apenas um q -bit transmitido.

Como em RMN temos misturas estatísticas, a análise do protocolo de codificação superdensa para estados mistos se faz necessária. O estado de equilíbrio de um sistema de RMN contendo

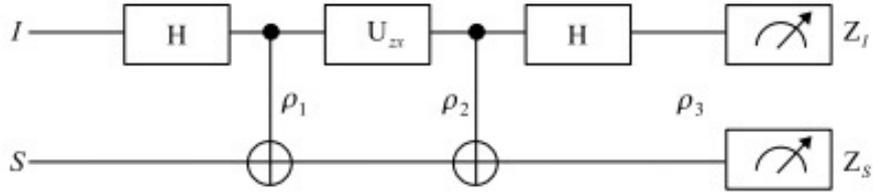


Figura 4.1: Circuito quântico para a codificação superdensa. Na primeira parte do circuito, o estado de entrada $|00\rangle$ é transformado no estado do gato, $|\phi^+\rangle$. Após, o operador de "mensagem" é aplicado, levando $|\phi^+\rangle$ em um dos quatro estados da base de Bell. A parte final do circuito indica a medida na base de Bell.

dois q -bits pode ser escrito na forma

$$\rho = (p_I|0\rangle\langle 0| + q_I|1\rangle\langle 1|) \otimes (p_S|0\rangle\langle 0| + q_S|1\rangle\langle 1|), \quad (4.1)$$

em que

$$p_i = \frac{1 + \epsilon_i}{2}, \quad q_i = \frac{1 - \epsilon_i}{2}, \quad (4.2)$$

e os índices I e S indicam cada um dos spins nucleares usados como q -bits. O parâmetro ϵ_i é a relação entre as energias magnética e térmica e é tipicamente $\approx 10^{-5}$, como visto na Seção 2.4.

Aplicando uma porta EPR (primeira parte do circuito na Figura 4.1) a esse estado, a saída será um estado Bell-diagonal:

$$\begin{aligned} \rho_1 = & p_I p_S |\phi^+\rangle\langle\phi^+| + p_I q_S |\psi^+\rangle\langle\psi^+| \\ & + p_S q_I |\phi^-\rangle\langle\phi^-| + p_I p_S |\psi^-\rangle\langle\psi^-|, \end{aligned} \quad (4.3)$$

em que $|\phi^+\rangle$, $|\psi^+\rangle$, $|\phi^-\rangle$ e $|\psi^-\rangle$ são os estados da base de Bell.

As magnetizações são medidas ao fim do circuito e são proporcionais à polarização estado, ϵ , e são dadas por

$$\langle Z_I \rangle = (-1)^z \epsilon_I, \quad \langle Z_S \rangle = (-1)^x \epsilon_S. \quad (4.4)$$

Se as variáveis x e z , a mensagem codificada, são conhecidas, a implementação da codificação superdensa por RMN é bem sucedida.

A condição estatística para o sucesso da implementação por RMN desse protocolo e a condição para o emaranhamento dos estados Bell-diagonais são a mesma, dada por [119]:

$$p_I p_S > \frac{1}{2} \quad (4.5)$$

Essa equação pode ser usada para definirmos uma testemunha de emaranhamento como $F = 1/2 - p_I p_S$. Usando as expressões para as probabilidades e para p_i e q_i , temos

$$F = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(1 + |\langle Z_I \rangle|)(1 + |\langle Z_S \rangle|). \quad (4.6)$$

As medidas das magnetizações Z_I e Z_S ao fim do circuito são equivalentes a medidas de ρ_1 (veja a Figura 4.1) na base de Bell, já que

$$\langle Z_I \rangle = \text{Tr}(\rho_f(Z_I \otimes \mathbb{1}_S)) = \text{Tr}(\rho_1(X_I \otimes X_S)) \equiv \langle W_1 \rangle, \quad (4.7)$$

$$\langle Z_S \rangle = \text{Tr}(\rho_f(\mathbb{1}_I \otimes Z_S)) = \text{Tr}(\rho_1(Z_I \otimes Z_S)) \equiv \langle W_2 \rangle, \quad (4.8)$$

o que nos leva a:

$$F = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(1 + |\langle W_1 \rangle|)(1 + |\langle W_2 \rangle|). \quad (4.9)$$

Essa equação mostra explicitamente que F é uma medida de correlações entre os dois q -bits.

4.2 Testemunhas de emaranhamento ótimas e decomponíveis em RMN

Nessa Seção, propomos um conjunto de testemunhas de emaranhamento ótimas e decomponíveis, que podem detectar o emaranhamento de estados na vizinhança dos estados de Bell. Com relação à testemunha F , o custo experimental é a medição de apenas mais uma medida local, de forma a obtermos uma melhor descrição do emaranhamento, como visto na Figura 4.7 (veja a próxima Subseção).

As novas testemunhas são da forma:

$$W = C_I \mathbb{1} + C_x X_I \otimes X_S + C_y Y_I \otimes Y_S + C_z Z_I \otimes Z_S. \quad (4.10)$$

A fim de garantir que W tenha um valor esperado positivo para todos os estados separáveis σ , temos apenas de impor que a transposta parcial de W seja um operador positivo, ou seja, que $W^{TA} \geq 0$. Isso decorre diretamente do fato de que se σ é um estado separado bipartido, então a sua transposta parcial, σ^{TA} , também o é. Portanto, $\text{Tr}(W\sigma^{TA}) = \text{Tr}(W^{TA}\sigma) \geq 0$, o que mostra que W é uma testemunha de emaranhamento bem definida.

Para um dado estado de Bell $|\beta_{ii}\rangle$, uma testemunha ótima na forma da Eq.(4.10) é obtida resolvendo-se o seguinte programa semidefinido (*PSD*): [94,97]:

	I	XX	YY	ZZ
$ \phi^+\rangle$	0.5	-0.5	0.5	-0.5
$ \psi^+\rangle$	0.5	-0.5	-0.5	0.5
$ \phi^-\rangle$	0.5	0.5	-0.5	-0.5
$ \psi^-\rangle$	0.5	0.5	0.5	0.5

Tabela 4.1: Testemunhas de emaranhamento ótimas para os estados de Bell na forma $W = C_I \mathbf{1} + C_x X_I \otimes X_S + C_y Y_I \otimes Y_S + C_z Z_I \otimes Z_S$.

$$\begin{aligned}
 & \text{minimize } \langle \beta_{ii} | W | \beta_{ii} \rangle \\
 & \text{sujeito a } \begin{cases} W^{TA} \geq 0, \\ W \leq \mathbf{1}. \end{cases} \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

O PSD dado em (4.11) nos fornece as testemunhas dadas na Tab. 1.

4.3 Experimento

Com essas duas testemunhas de emaranhamento definidas, podemos analisá-las em três classes de estados:

- estados emaranhados detectados por F ;
- estados emaranhados não detectados por F ;
- estados separáveis.

Essas três classes de estados serão consideradas usando os estados Bell-diagonais, que são definidos como

$$\rho = \frac{1}{4} \mathbf{1} + \sum_{i=1}^3 c_i I_i \otimes I_i, \quad (4.12)$$

em que $c_i \in [-1, 1]$. Para essa classe de estados, a região de detecção de emaranhamento por F é dada pelo volume sombreado no lado esquerdo da Figura 4.2. O volume vazio no interior do tetraedro da esquerda representa os estados não detectados por F . Os estados separáveis são representados pelo octaedro na Figura à direita. As testemunhas de emaranhamento F e W podem detectar a presença de emaranhamento não apenas para os estados Bell-diagonal,

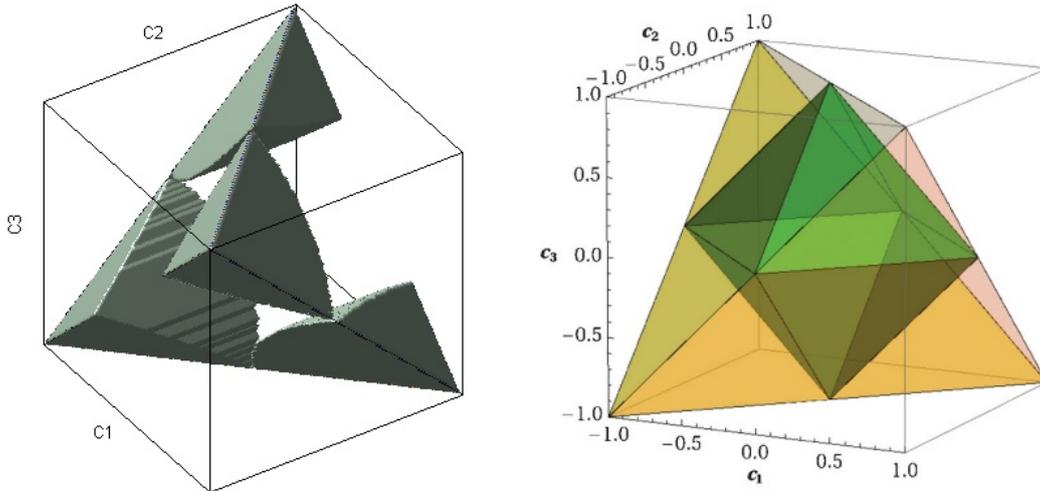


Figura 4.2: No lado direito é mostrada a geometria dos estados Bell-diagonal, em que o octaedro no interior é a região dos estados separáveis, com os estados emaranhados fora desse octaedro. No lado esquerdo, os estados Bell-diagonal emaranhados e detectados por F estão no volume sombreado. O espaço vazio na Figura representa os estados Bell-diagonal tais que $F \geq 0$, ou seja, os estados emaranhados não detectados por F e os estados separáveis. A Figura no lado direito é retirada de [120].

mas para qualquer classe de estados. Adiante mostraremos a detecção de emaranhamento por essas duas testemunhas no processo de descoerência de RMN, a relaxação transversal.

A medição das magnetizações foi feita diretamente a partir dos espectros de RMN. O espectro de uma molécula de 2 spins 1/2, ou seja, dois q-bits, nos fornece diretamente as medidas de quatro projetores no espaço de Hilbert-Schmidt, combinando-se as intensidades normalizadas das duas linhas do espectro para cada núcleo (veja a Seção 2.5 do Capítulo 2). Por exemplo, os valores medidos no primeiro núcleo (com uma equação similar para os valores medidos no segundo núcleo) são dados por

$$\begin{pmatrix} \text{Tr}(\rho \tilde{I}_- \otimes \mathbb{1}) \\ \text{Tr}(\rho \tilde{I}_- \otimes \tilde{Z}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S(\omega_1 - \omega_{12}) \\ S(\omega_1 + \omega_{12}) \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

em que $\tilde{I}_- = U(X - iY)U^\dagger$ e $\tilde{Z} = UZU^\dagger$. U é um pulso de leitura que transforma quatro observáveis desejados da base do espaço de Hilbert-Schmidt em $I_- \otimes \mathbb{1}$ e $I_- \otimes Z$, os quatro elementos da base que são observados no espectro de RMN. $S(\omega_1 - \omega_{12})$ e $S(\omega_1 + \omega_{12})$ são as intensidades das linhas.

O pulso de leitura que leva os elementos desejados da base nos que são observados no espectro é um pulso de $(\pi/2)$ na direção x ou y em um ou ambos os spins. Por exemplo, para medirmos as duas funções de correlação desejadas, $\langle Z \otimes Z \rangle$ e $\langle X \otimes X \rangle$, o pulso de leitura

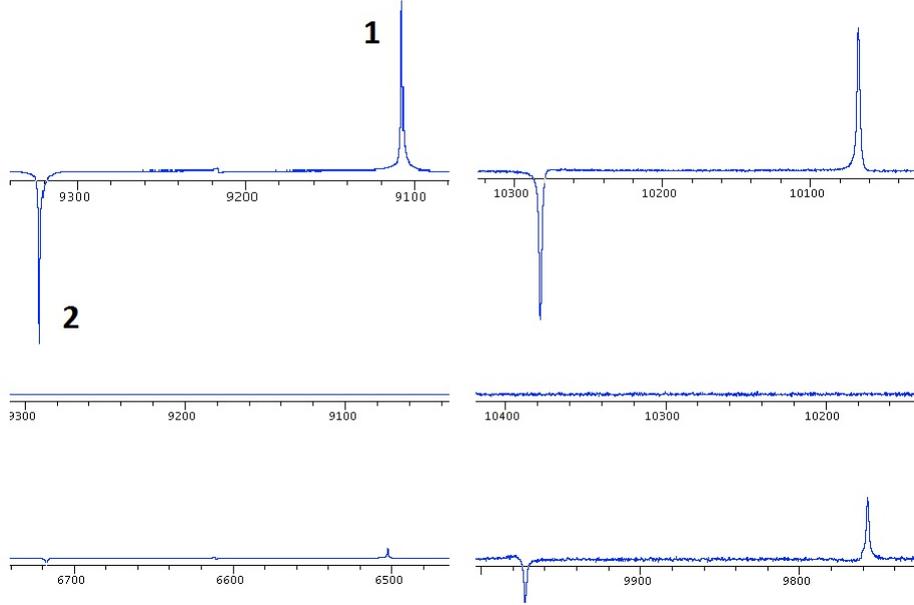


Figura 4.3: Os espectros de RMN usados na medição das funções de correlação $\langle X_I \otimes X_S \rangle$ e $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle$ para cada um dos estados preparados. O espectro de 1H está no lado esquerdo, enquanto os de ^{13}C estão à direita. (i) espectros de RMN para o estado $|\phi^-\rangle$. Para ilustrarmos a medição das funções de correlação, $\langle X_I \otimes X_S \rangle$ é medida pela diferença entre as intensidades normalizadas das linhas 1 e 2 no lado esquerdo. (ii) espectros de RMN para a identidade. (iii) espectros observados no estado emaranhado não detectado por F .

necessário é um pulso $(\pi/2)_y$ no segundo q-bit, o núcleo de ^{13}C nesse caso. As duas funções de correlação são dadas na segunda linha do membro esquerdo da Eq. (4.13), ou seja, a diferença entre as intensidades normalizadas no espectro de cada núcleo (veja a Seção 2.5 do Capítulo 2). A função de correlação $\langle X_I \otimes X_S \rangle$ é observada na parte real do espectro de 1H , enquanto $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle$ é observada na parte real do espectro de ^{13}C . As medidas foram obtidas após o ajuste de fase usando o espectro de equilíbrio como referência, e a remoção do sinal de fundo presente no espectro de RMN.

O estado detectado por F preparado é o estado $|\phi^-\rangle$, para o qual foram medidas $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle = 1.00 \pm 0.01$ e $\langle X_I \otimes X_S \rangle = -1.01 \pm 0.01$. Esses valores nos fornecem $F = -0.51 \pm 0.01$, em excelente acordo com os valores teóricos, dados por $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle = 1.00$, $\langle X_I \otimes X_S \rangle = -1.00$ e $F = -0.50$. O estado Bell-diagonal emaranhado e não detectado por F é dado por $c_1 = -0.20$, $c_2 = 1.00$ e $c_3 = 0.20$. Para esse estado, foram medidas $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle = 0.22 \pm 0.01$ e $\langle X_I \otimes X_S \rangle = -0.17 \pm 0.01$, que resultam em $F = 0.15 \pm 0.01$. Enquanto os valores teóricos são $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle = 0.20$ e $\langle X_I \otimes X_S \rangle = -0.20$, resultando em $F = 0.14$. Como exemplo de estado separável, preparamos a identidade, que é o estado de mistura estatística máxima. Para esse estado, temos $\langle Z_I \otimes Z_S \rangle = 0.01 \pm 0.01$ e $\langle X_I \otimes X_S \rangle = 0.00 \pm 0.01$, levando a $F = 0.25 \pm 0.01$. Todos os valores esperados teóricos para as funções de correlação são nulos para a identidade, com $F = 0.25$. As fidelidades dos estados tomografados são da ordem de 0.99, 0.97 e 0.98,

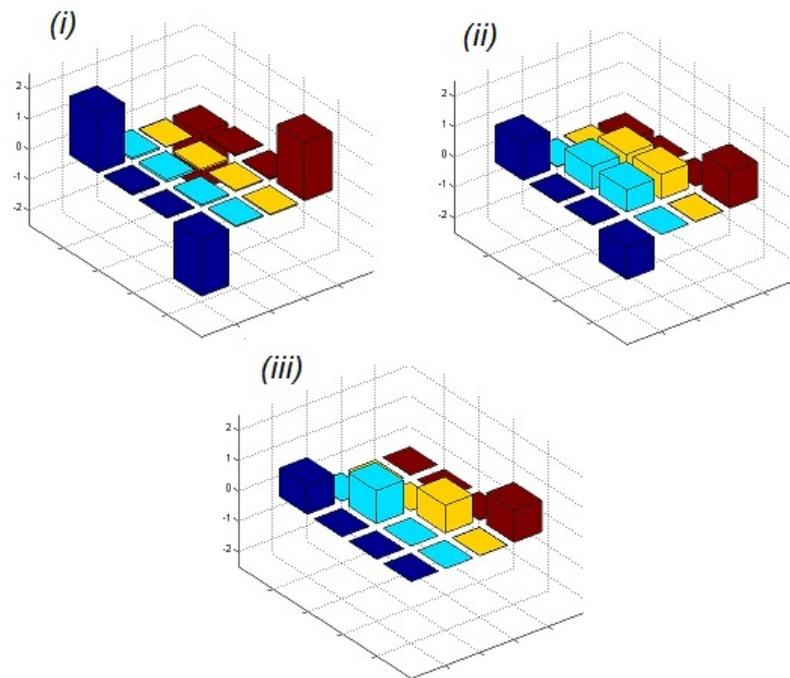


Figura 4.4: Tomografia de estado dos três estados. As partes reais são multiplicadas por um fator de 4 a fim de tornar os erros experimentais mais claros, e as partes imaginárias são da mesma ordem das flutuações nas partes reais das matrizes tomografadas em todos os casos. (i) tomografia do estado $|\phi^-\rangle$. (ii) tomografia de estado da identidade, o estado separável. (iii) o estado Bell-diagonal emaranhado e não detectado por F .

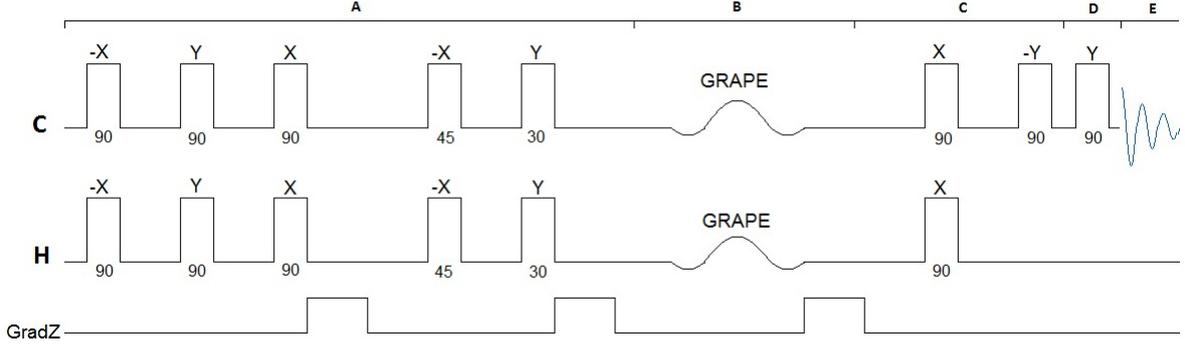


Figura 4.5: Sequência de pulsos empregada na preparação do estado emaranhado não detectado por F . A primeira parte, (A), é a passagem do estado de equilíbrio térmico para o estado pseudo-puro $|00\rangle$, após, o pulso modulado usando o GRAPE (B), a porta pseudo-EPR (C), o pulso de leitura e a medição. Essa é a sequência para a medição no núcleo de ^{13}C . Para a medição no ^1H , a sequência de pulsos é a mesma, mas com as linhas correspondentes a cada núcleo trocadas. Acima cada retângulo indica um pulso de radiofrequência. A fase de cada pulso está acima dos retângulos, enquanto o ângulo de rotação está abaixo.

respectivamente. Os estados tomografados podem ser vistos na Figura 4.4.

Como as testemunhas de emaranhamento W demandam a medição de mais um projetor, a aplicação de mais um pulso de leitura é necessária para a medição de $\langle Y_I \otimes Y_S \rangle$. Nesse caso, o pulso $(\pi/2)_x$ no ^{13}C . Os valores de $\langle Y_I \otimes Y_S \rangle$ para os estados preparados são dados por 0.96 ± 0.01 , 0.96 ± 0.01 e 0.00 ± 0.01 , respectivamente. Os valores esperados teóricos são, respectivamente, 1.00, 1.00 e 0.00. Para o estado $|\phi^-\rangle$, é preciso usar a testemunha dada pelos valores da terceira da tabela 4.2, como o estado não detectado por F está na mesma região do tetraedro (veja a Figura 4.2) a mesma testemunha de emaranhamento é adequada para calcularmos o emaranhamento desse estado. Os valores medidos para W nos três estados preparados é $W_{|\phi^-\rangle} = -1.01 \pm 0.01$, para $|\phi^-\rangle$. Para o estado não detectado por F , temos $W_{|\phi^-\rangle} = -0.20 \pm 0.01$, que mostra que esse estado é detectado por W . Para a identidade, temos $W_{|\phi^-\rangle} = 0.50 \pm 0.01$.

O emaranhamento medido em cada estado é dado por 0.96 ± 0.01 , 0.14 ± 0.01 e 0.00 ± 0.01 , respectivamente. A quantificação de pseudo-emaranhamento foi feita usando a robustez generalizada [96], discutida na Seção 3.1.

As preparações de estado para $|\Phi^-\rangle$ e a identidade foram feitas utilizando-se o método proposto em [22], enquanto o estado não detectado por F foi produzido utilizando a técnica de otimização GRAPE [54] (veja a seção 2.3.4 do Capítulo 2), que leva o estado $|00\rangle$ ao estado $\sqrt{0.6}|00\rangle + \sqrt{0.4}|11\rangle$. Um gradiente de campo é aplicado de forma a eliminar as coerências desse estado, e o estado desejado é obtido após a aplicação de uma porta pseudo-EPR (veja a Figura 4.5). O método de tomografia de estado aqui empregado é proposto em [121].

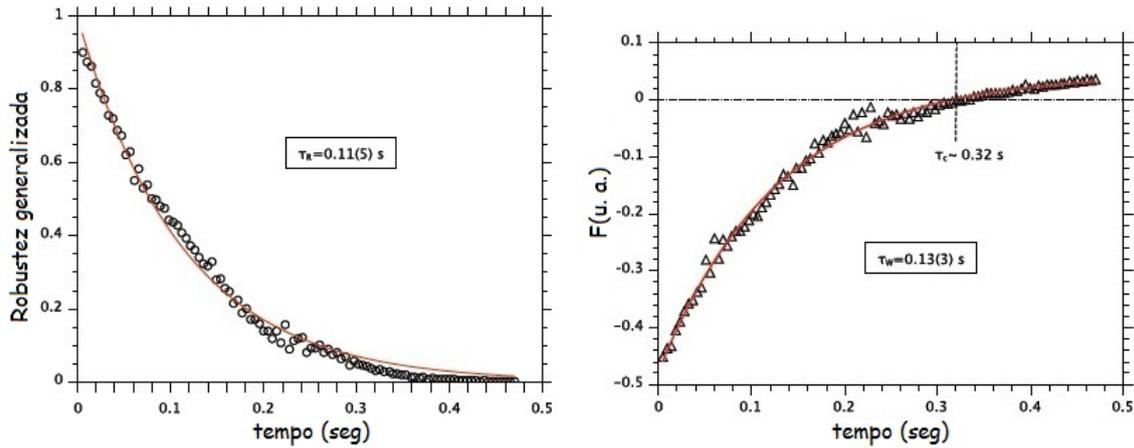


Figura 4.6: Detecção de emaranhamento por F e pela robustez generalizada na relaxação do estado $|\phi^-\rangle$. A Figura mostra explicitamente que existem estados que são emaranhados mas que não são detectados por F não apenas para estados Bell-diagonais, já que a descoerência de $|\phi^-\rangle$ leva a estados fora da classe dos estados Bell diagonais. Essa região é localizada entre os tempos próximos a 0.3s e 0.4s . Nas Figuras, τ_R e τ_W são os tempos característicos das curvas de detecção de emaranhamento pela robustez generalizada e por F , respectivamente. O tempo τ_C é o tempo aproximado que indica o fim da detecção de emaranhamento por F .

Como uma extensão do estudo acima, a detecção de emaranhamento por F na relaxação do estado $|\phi^-\rangle$ foi estudada. Usando a robustez generalizada [96] para quantificar o emaranhamento, é possível comparar a detecção de emaranhamento pelos dois métodos. Como pode ser visto na Figura 4.6, a testemunha de emaranhamento para detectar o emaranhamento em $\tau_c = 0.32$ segundos, próximo ao tempo de relaxação transversa do hidrogênio, dado por $0.31(2)$ segundos para essa amostra, enquanto a robustez generalizada ainda mostra a presença de emaranhamento por alguns milissegundos a mais. No entanto, como fica claro a partir da Figura, os valores de F indicam a presença de emaranhamento ao longo da maior parte do processo de descoerência. Além disso, também fica claro, a partir da análise de dados da robustez generalizada, que o pseudo-emaranhamento decai com um tempo característico dado pelo menor tempo de descoerência do sistema, nesse caso, o tempo de relaxação transversa do núcleo de ^{13}C , que é de $0.11(2)$ segundos para essa amostra.

Na Figura 4.7, comparamos as testemunhas F e W para a relaxação do estado $|\phi^-\rangle$. Por um lado, vemos que W é mais sensível que F e é um melhor quantificador de emaranhamento. Por outro lado, as duas testemunhas detectam o pseudo-emaranhamento na mesma região.

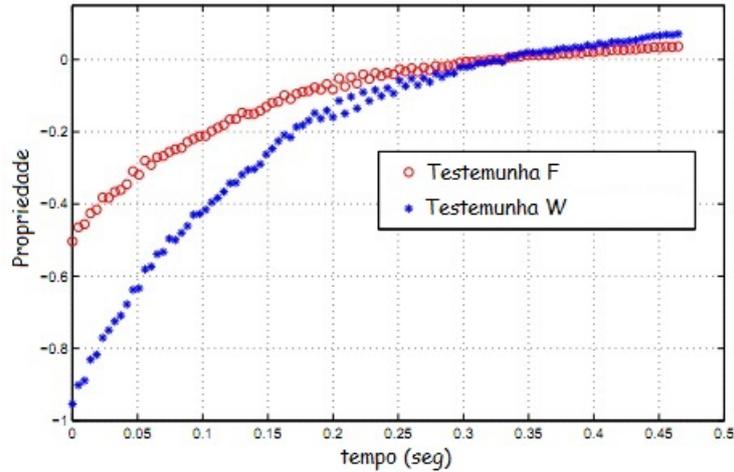


Figura 4.7: Detecção de emaranhamento por F e W na relaxação. As duas testemunhas detectam emaranhamento na mesma região, mas W quantifica o emaranhamento melhor que F .

4.4 Conclusões

Nesse trabalho, foi feita a implementação e análise experimental da testemunha de emaranhamento F , proposta por Rahimi *et al* [119], no contexto de experimentos de RMN. Mostramos explicitamente a detecção de pseudo-emaranhamento em duas situações diferentes. Inicialmente, foi mostrada a região de detecção de F para a classe dos estados Bell-diagonais, com exemplos de estados emaranhados que são detectados e não são detectados por essa testemunha, e um estado separável. Também foi analisada a detecção de pseudo-emaranhamento por F no processo de descoerência de RMN, a relaxação transversal. Nesse caso, foi claramente demonstrada a presença de um intervalo de tempo no qual ainda há uma pequena presença de pseudo-emaranhamento, mas que não é detectado pela testemunha de emaranhamento. Apesar de essa testemunha não poder ser utilizada para a quantificação de emaranhamento para as duas classes de estados estudadas nesse trabalho, essa testemunha de emaranhamento pode detectar o pseudo-emaranhamento para um grande número de estados nessas duas situações com a realização de apenas duas medições sobre o sistema. Enquanto para a reconstrução completa do estado via tomografia de estado quântico, necessária para a quantificação de emaranhamento usando medidas como a concorrência e a robustez generalizada, é necessária a realização de oito experimentos (quatro medições no ^{13}C e quatro no ^1H).

Também foram propostas, via otimização por PSD , outras quatro testemunhas de emaranhamento W , que são ótimas para cada uma das regiões de estados Bell-diagonal emaranhados. Como pode ser visto por um exemplo, essas testemunhas podem detectar estados Bell-diagonal emaranhados que não são detectados por F . No contexto da relaxação, a comparação entre as testemunhas de emaranhamento W e F mostra que ambas detectam o pseudo-emaranhamento

na mesma região, mas W possui a vantagem de quantificar melhor o pseudo-entrelaçamento nessa região.

Parte II

Versão quântica do experimento de escolha retardada de Wheeler

Capítulo 5

Experimentos de escolha retardada de Wheeler

“It’s like neither”

R. P. Feynman

Alguns conceitos da mecânica quântica, como o emaranhamento e a dualidade onda partícula desafiam a nossa intuição. A dualidade onda-partícula é relacionada ao debate iniciado ainda à época de Newton, sobre a natureza da luz, se ondulatória ou corpuscular. No início do século XIX, o experimento de fenda dupla de Young tornou mais aceita a visão ondulatória da luz. Einstein reacendeu a hipótese de uma natureza corpuscular da luz com os estudos ligados ao efeito fotoelétrico, em 1905. Esse debate novamente ganhou fôlego, de forma mais ampla, com a Mecânica Quântica, que previu comportamentos ondulatórios para os elétrons, como as possibilidades de difração e interferência dessas partículas. A dualidade entre esses dois comportamentos levou Bohr a enunciar o seu princípio de complementaridade, que afirma que os comportamentos de onda e partícula são complementares e não podem ser observados com um único aparato experimental. Para testar esse princípio e excluir possíveis tipos de variáveis ocultas ligadas a esse princípio, Wheeler propôs seu famoso experimento de escolha retardada, que elimina uma relação causal entre a escolha do aparato experimental e o comportamento do sistema como onda ou partícula. O recente desenvolvimento da área de informação quântica possibilitou a proposta de um novo experimento para testar o princípio de complementaridade. Essa proposta exige uma abordagem nova sobre esse princípio, já que apenas um aparato experimental é utilizado para observar os comportamentos de onda e partícula de um sistema quântico. A complementaridade é presente nos dados experimentais que permitem a observação desses dois comportamentos, não mais nos aparatos experimentais.

Este Capítulo trata de uma pequena revisão sobre o princípio de complementaridade e o experimento de escolha retardada de Wheeler, tanto na versão clássica [13] quanto na versão

quântica, proposta por Ioniciou e Terno [24]. Também são discutidas as implementações experimentais desses experimentos no contexto de ótica quântica [14, 29–31].

5.1 Princípio de Complementaridade

Sistemas quânticos comportam-se tanto como partículas como quanto ondas. Como discutido no Capítulo 1, em um experimento de interferência de fenda dupla com elétrons, os elétrons comportam-se como ondas ou como partículas. Os elétrons passam pelas fendas e formam franjas de interferência nos detectores. Como explicar esse padrão de interferência sem a hipótese de que o elétron passou por ambas as fendas? Einstein apontou que, pelo menos a princípio, seria possível medir o recuo nos detectores devido a cada elétron que chegasse aos detectores. Como explicar cada recuo desses sem a hipótese de que o elétron tenha passado por apenas uma das fendas?

O raciocínio de Einstein é intuitivo, como afirmado por Bohr [122]. Suponhamos que tanto os recuos dos detectores quanto as franjas de interferência possam ser medidos. Dos dados relacionados aos recuos, é obtida a informação sobre o caminho que os elétrons passaram, por uma das duas fendas. Para explicar o aparecimento das franjas de interferência, é necessária hipótese de que os elétrons passaram por ambas as fendas. No entanto, essa conclusão é auto-contraditória, já que o comportamento do elétron dependeria de uma fenda pela qual não passou. Portanto, a mecânica quântica destruiria a si mesma por uma inconsistência interna.

A resposta de Bohr a esse raciocínio é tida como uma lição central da mecânica quântica. Podemos registrar os recuos ou as franjas de interferência, mas nunca os dois juntos. O arranjo para que um seja observado automaticamente elimina a observação do outro. O elétron possui momento p , o que implica em um comprimento de onda de de Broglie $\lambda = h/p$. Para que sejam observadas as franjas de interferência, deve-se fixar a posição do detector tal que

$$\Delta y < \Delta F < \left(\frac{L}{2s}\right) \lambda, \quad (5.1)$$

em que ΔF é o espaçamento entre as franjas, L é a distância entre a fenda dupla e o anteparo e s é a distância que separa as duas fendas. Para que se possa obter por qual das fendas o elétron passou, deve-se medir o recuo no detector com uma distância pequena o suficiente para que se possa distinguir entre um elétron de momento $p = h/\lambda$ vindo de baixo, com uma inclinação s/L , e um elétron com o mesmo momento, mas vindo de cima, na inclinação oposta. Assim,

$$\Delta p_y < \left(\frac{s}{L}\right) \frac{h}{\lambda}. \quad (5.2)$$

Combinando as duas equações acima, que são as condições para que o detector sirva para se

observar os dois comportamentos, conclui-se que esse detector teria de ser incompatível com o que o princípio de incerteza [1] tem a dizer sobre sua dinâmica na direção y :

$$\Delta y \Delta p_y > \frac{\hbar}{2}. \quad (5.3)$$

Esse fato levou Bohr a enunciar o seu princípio de complementaridade: as medições de variáveis canonicamente conjugadas impõem conclusões conflitantes [123]. Quanto mais um experimento satisfaz às condições para a medição de uma variável, menos ele satisfaz às condições para a medição de sua variável canonicamente conjugada. Dessa forma, a Eq. (5.3) é uma quantificação da complementaridade entre a posição e o momento de uma partícula. Voltando ao experimento de dupla fenda, a incerteza na posição das fendas, resultante de uma medida suficientemente precisa do momento do elétron é a distância entre dois máximos de interferência, dado por $D = \lambda L/s$. Como o princípio de incerteza impossibilita a medição da distância entre as fendas a um valor mais preciso que D , as franjas de interferência não são observadas. Assim, quando podemos obter a informação sobre por qual fenda o elétron passou, nenhuma interferência é observada. Segundo Bohr, o princípio de complementaridade elimina a conclusão paradoxal de que o comportamento do elétron depende da presença de uma fenda pela qual o elétron não tenha passado.

5.1.1 Interferômetro de Mach-Zehnder

Um dos aparatos experimentais mais utilizados na literatura para experimentos envolvendo o princípio de complementaridade, nas mais diversas técnicas experimentais [124–130], é o interferômetro de Mach-Zehnder [131]. Esse interferômetro funciona da seguinte maneira: um fóton incide em um divisor de feixe (\mathcal{BS}_c na Fig. 5.1), e se propaga via dois caminhos, a e b , para um segundo divisor de feixe (\mathcal{BS}_q), que direciona a partícula para um dos detectores. Ao longo de um dos caminhos, há um dispositivo que cria uma diferença de fase ϕ entre os dois caminhos.

Se o caminho a é associado ao estado $|0\rangle$ e o caminho b ao estado $|1\rangle$, temos a seguinte sequência de transformações no estado do fóton, se inicialmente no estado $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle) \rightarrow \\ &\rightarrow \cos \frac{\phi}{2}|0\rangle - i \sin \frac{\phi}{2}|1\rangle. \end{aligned}$$

Ao fim do interferômetro, as probabilidades de se detectar o fóton nos detectores D_a e D_b

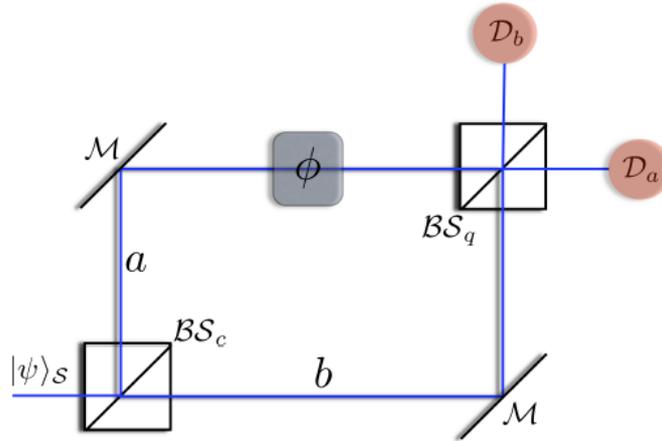


Figura 5.1: Interferômetro de Mach-Zehnder.

são dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned} P_0 &= \cos^2 \frac{\phi}{2} & \text{e} \\ P_1 &= \sin^2 \frac{\phi}{2} . \end{aligned} \quad (5.4)$$

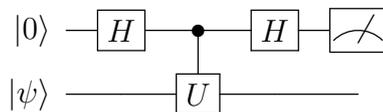
Como pode se ver, as probabilidades de detecção dependem da diferença de fase entre os caminhos, caracterizando um padrão de interferência. Assim, o papel de cada um dos integrantes do interferômetro é claro. O primeiro divisor de feixe cria uma superposição dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, enquanto o deslocador de fases cria a diferença de fase entre os caminhos. O segundo divisor de feixe apaga a informação de caminho do estado do fóton, eliminando a informação sobre por qual caminho o fóton passou. Esse último processo é a parte mais importante para o experimento de escolha retardada, como veremos adiante na próxima Subseção. O experimento de Mach-Zehnder, com fótons individuais, foi realizado pela primeira vez pelo grupo de Aspect, em 1986 [132].

Esse esquema pode facilmente ser entendido em um contexto mais geral de computação quântica, através de uma sequência de portas lógicas [133]. Uma vantagem dessa abordagem é a independência de um sistema experimental específico, de forma que entendendo-se o experimento em um sistema, entende-se em todos os outros. Os divisores de feixe são representados por portas Hadamard, enquanto o deslocador de fase é representado por uma porta de fase. Em particular, qualquer experimento de interferência com um q -bit pode ser entendido pela sequência ilustrada no circuito quântico abaixo

$$- \boxed{H} - \boxed{\phi} - \boxed{H} -$$

Uma conexão direta desse interferômetro com a computação quântica é dada pela seguinte

construção [131], que utiliza uma porta U controlada atuando em dois sistemas: um q -bit inicialmente no estado $|0\rangle$ e um segundo q -bit no estado $|\psi\rangle$, autoestado de U . Essa construção pode ser descrita pelo seguinte circuito:



Nesse exemplo, mostrado no circuito acima, temos a seguinte sequência de transformações nos q -bits:

$$\begin{aligned} |0\rangle \otimes |\psi\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle) \otimes |\psi\rangle \rightarrow \\ &\rightarrow \cos \frac{\phi}{2}|0\rangle - i \sin \frac{\phi}{2}|1\rangle \otimes |u\rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Como o estado do q -bit auxiliar, $|\psi\rangle$, é autoestado de U , seu autovalor $e^{i\phi}$ é “jogado” para o estado do primeiro q -bit, à frente da componente $|1\rangle$ do estado, criando uma diferença de fase. Como podemos ver claramente pela sequência de transformações (5.5), esse circuito é uma simulação exata de uma medida interferométrica usando um interferômetro de Mach-Zehnder e é a base de vários algoritmos quânticos, como o algoritmo de Shor [18] e o circuito de espalhamento [134].

5.2 O experimento de escolha retardada de Wheeler

Uma das opções levantadas por Wheeler [13] para a realização do experimento de escolha retardada utiliza o interferômetro de Mach-Zehnder. Nesse caso, o principal ingrediente, como mencionado na Subseção anterior, é o segundo divisor de feixe do interferômetro. A função desse divisor de feixe é apagar a informação sobre qual caminho o fóton passou, o que permite a observação do padrão de interferência nos detectores da Fig. 5.1. Assim, a presença ou não desse divisor de feixe é o que implica na observação de um padrão de interferência, característico de uma onda, ou na obtenção de informação sobre o caminho percorrido pelo fóton, característico de uma partícula.

Na ausência do segundo divisor de feixe, o estado do fóton logo antes de chegar ao detector é dado pela superposição $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, que implica em uma estatística nos detectores dada por

$$\begin{aligned} P_0 &= \frac{1}{2} \quad , \\ P_1 &= \frac{1}{2} \quad , \end{aligned} \quad (5.6)$$

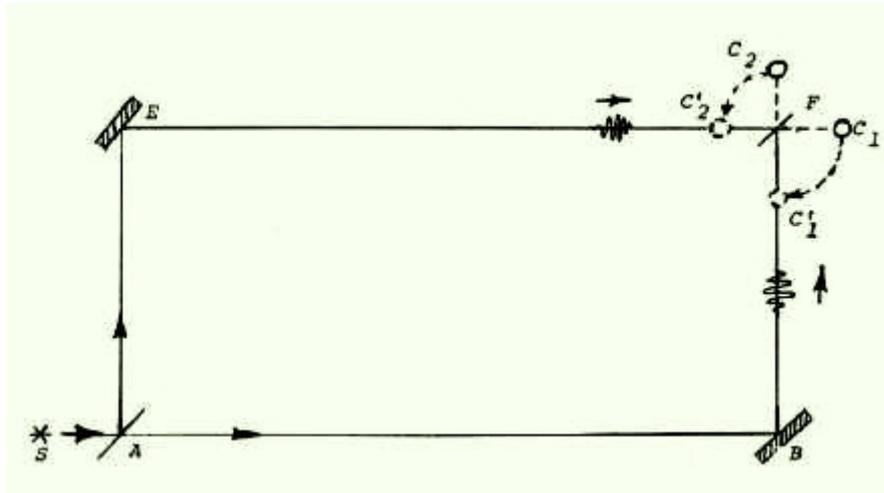


Figura 5.2: Proposta de experimento de escolha retardada utilizando um interferômetro de Mach-Zehnder. Retirado de [13].

que é independente da diferença de fase criada pelo deslocador de fase. Assim, dependendo de como o aparato experimental é montado, se observa um fenômeno de interferência ou se obtém qual dos caminhos do interferômetro foi percorrido pelo fóton. Mas, em conformidade com o princípio de complementaridade, não é possível se realizar os dois tipos de observação simultaneamente.

Adicionando a esse experimento o ingrediente da escolha retardada, obtém-se o arranjo experimental da Fig. 5.2. Nesse caso, a proposta de Wheeler é de que a posição dos detectores seja trocada entre as posições C_1 e C_2 ou C'_1 e C'_2 a partir da escolha do experimentador e de forma que o fóton já tenha passado primeiro divisor de feixe, A . É importante notar que os eventos da passagem pelo primeiro divisor de feixe e a escolha por quais posições dos detectores, se C_1 e C_2 ou C'_1 e C'_2 , devem ser desconectados causalmente. Ou seja, devem possuir uma separação tipo espaço. Nas palavras de Wheeler (em tradução livre), como nenhum sinal pode viajar mais rápido do que a luz “temos uma estranha inversão na ordem normal do tempo. Nós, agora, colocando ou retirando o espelho temos um efeito inevitável sobre o que podemos dizer sobre o passado do fóton.” [135].

5.2.1 Realização experimental

Desde a proposta de Wheeler, vários experimentos foram realizados [132,136–139], mas nenhum seguiu completamente as ideias originais. Em 2007, Jacques *et al* realizaram o experimento de acordo com a proposta de Wheeler em um experimento de ótica quântica. Para tal, foi utilizada uma montagem em que o segundo divisor de feixe é colocado ou retirado de forma aleatória, com o auxílio de um gerador de números aleatórios quântico [140].

Os fótons são emitidos de um centro de vaga de nitrogênio em diamante e são enviados com

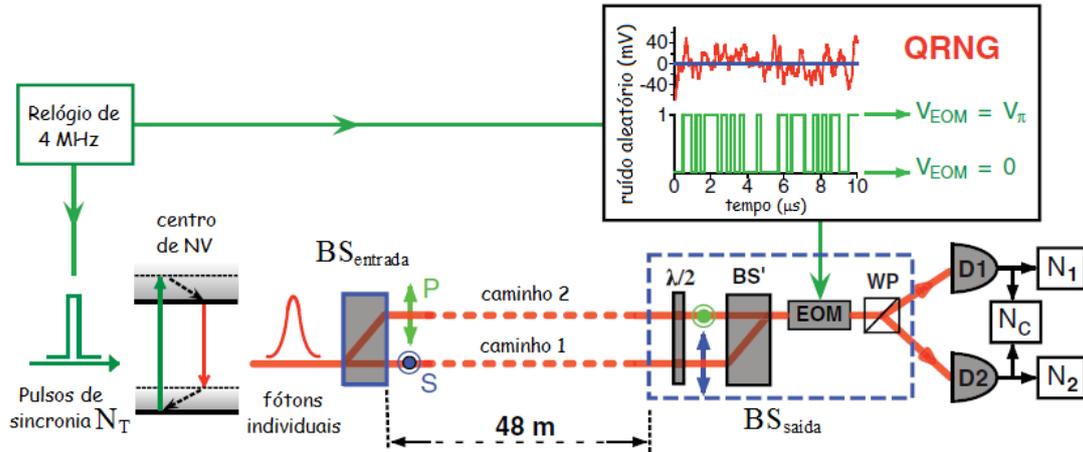


Figura 5.3: Realização experimental do experimento de Wheeler. Retirado de [14]

uma polarização bem definida em um divisor de feixe para um interferômetro com 48 metros de comprimento, com dois braços associados a polarizações ortogonais S e P . O divisor de feixe removível BS_{saida} (veja a Fig. 5.3) consiste de uma combinação de uma placa de meia onda, um divisor de feixe de polarização BS' , um modulador eletro-ótico com eixo ótico orientado a $22,5^\circ$ das polarizações de entrada e um prisma de Wollaston. A escolha entre as duas configurações é feita pelo modulador eletro-ótico, que pode ser configurado em duas configurações dentro de um tempo de $40ns$. Se uma tensão é aplicada ao modulador, o divisor de feixe BS_{output} é colocado, caso não seja aplicada a tensão, o divisor de feixe é ausente.

O tamanho dos braços do interferômetro ($48m$) implica em um tempo de voo para os fótons de $160ns$. Um número binário aleatório 0 ou 1, gerado por um gerador de números aleatórios quântico, decide pela aplicação ou não da tensão sobre o modulador eletro-ótico em $40ns$, depois de um atraso do circuito eletrônico de $80ns$. Dois sinais sincronizados a partir de um relógio são usados para disparar a emissão do fóton e o gerador de números aleatórios quântico. No referencial do laboratório, a escolha aleatória entre as duas configurações do interferômetro, se aberto ou fechado, é feita simultaneamente com a entrada do fóton no interferômetro. Como o gerador de números aleatórios quântico está ao final do interferômetro, podemos garantir que o fóton entre no cone de luz futuro da escolha aleatória quando está no meio do interferômetro, após ter passado por BS_{input} .

O experimento foi realizado modificando-se aleatoriamente o estado do modulador para cada fóton enviado ao interferômetro, correspondendo a uma escolha aleatória entre as duas configurações possíveis, com o segundo divisor de feixe presente ou ausente. A diferença de fase entre os dois braços do interferômetro é obtida com o auxílio de um atuador pizoelétrico. Na Fig. 5.4 observa-se claramente em (a) a aparição de um padrão de interferência quando a tensão é aplicada sobre o modulador eletro-ótico. Na mesma Figura, em (b) é observada a mesma probabilidade de detecção nos dois detectores quando o modulador não recebe tensão.

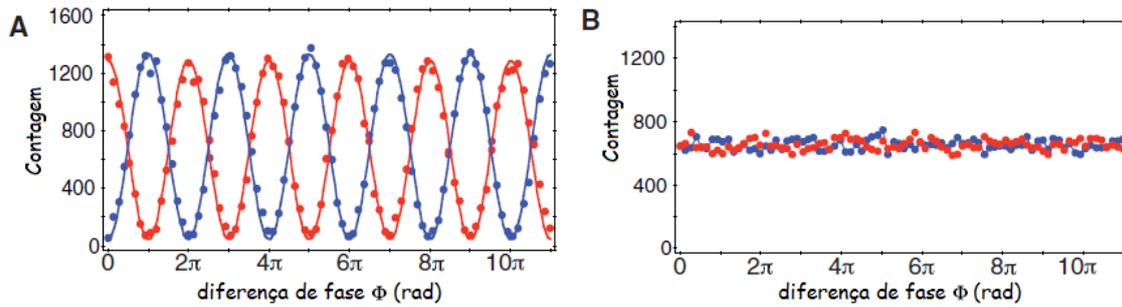


Figura 5.4: Resultados do experimento de escolha retardada. Retirado de [14]

Essa realização do experimento de escolha retardada de Wheeler mostra que o comportamento do fóton em um interferômetro depende da escolha do observável que é medido, mesmo que a escolha seja feita em uma posição e um instante que sejam separados da entrada do fóton no interferômetro por um intervalo de tipo espaço.

5.3 Versão quântica do experimento de escolha retardada

A proposta de Wheeler elimina uma possível relação causal entre o comportamento do q -bit, se de onda ou partícula, com a escolha do aparato experimental a ser utilizado. No entanto, ainda persiste a complementaridade entre os dois aparatos experimentais: ou o interferômetro está aberto, o que leva a um comportamento de partícula, ou está fechado, o que implica em um comportamento ondulatório. Isso implica que uma visão realística dos q -bits ainda pode ser obtida, já que os q -bits comportam-se como ondas ou como partículas durante todo o tempo.

Em 2011, motivados por essa questão, Ioniciu e Terno [24] propuseram uma versão quântica desse experimento, trocando o controle clássico da proposta de Wheeler por um dispositivo quântico. Usando a linguagem de circuitos quânticos, a proposta de Wheeler pode ser encarada como um sistema contendo um q -bit auxiliar no estado $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, que sofre uma medida e o segundo divisor de feixe do interferômetro de Mach-Zehnder é ausente ou presente, dependendo do resultado dessa medida. Esse dispositivo pode ser representado por uma porta Hadamard que atua ou não condicionada ao resultado da medida sobre o q -bit auxiliar (veja a Fig. 5.5(a)). Se esse dispositivo é trocado por um dispositivo quântico, que consiste de um q -bit auxiliar em um estado de superposição que atua como controle de uma porta Hadamard-controlada, que tem como alvo o q -bit que se encontra no interior do interferômetro. Esse dispositivo pode ser representado pelo circuito da Fig. 5.5(b).

A introdução desse dispositivo implica que o segundo divisor de feixe está em um estado de superposição entre estar “presente e ausente”. Da interpretação de Wheeler do experimento

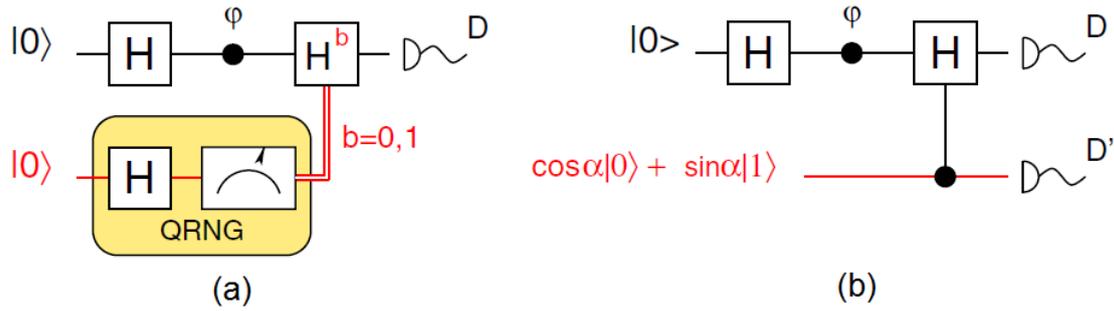


Figura 5.5: Representação em circuitos quânticos dos experimentos de escolha retardada de Wheeler (a) e sua versão quântica (b). Retirado e adaptado de [24].

[135], isso implica que o q -bit está em uma superposição de partícula e onda ao mesmo tempo. Uma outra implicação da introdução do dispositivo quântico é a quebra da ordem temporal entre as medidas sobre o q -bit auxiliar e sobre o q -bit que passa pelo interferômetro (referido como sistema daqui em diante). A medida sobre o q -bit auxiliar pode ser feita após a medida sobre o sistema, e o comportamento do sistema só é conhecido, se de partícula ou de onda, após a correlação dos resultados experimentais entre as medidas sobre o q -bit auxiliar e o sistema. Combinados, esses fatos implicam na não necessidade de uma separação tipo espaço entre a entrada do q -bit no interferômetro e a escolha se o segundo divisor de feixe estará presente ou não.

Ao final do circuito, o estado do sistema todo é dado por

$$|\psi\rangle = \cos \alpha |p\rangle_S |0\rangle_A + \sin \alpha |w\rangle_S |1\rangle_A, \quad (5.7)$$

em que $|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\varphi}|1\rangle)$ é o estado ligado ao comportamento de partícula e $|w\rangle = \cos \frac{\varphi}{2}|0\rangle - i \sin \frac{\varphi}{2}|1\rangle$ é o estado ligado ao aparecimento de franjas de interferência. A estatística observada no detector D_0 agora é dada por

$$I_0(\varphi, \alpha) = I_p \cos^2 \alpha + I_w(\varphi) \sin^2 \alpha, \quad (5.8)$$

e $I_p = 1/2$ é a contagem no detector característica de uma partícula e I_w é a contagem ligada ao comportamento ondulatório e ligada à visibilidade \mathcal{V} pela relação $\mathcal{V} = (I_{max} - I_{min}) / (I_{max} + I_{min}) = \sin^2 \alpha$. Dessa forma, temos uma transição suave entre os comportamentos de partícula, para $\alpha = 0$, e o comportamento ondulatório, para $\alpha = \pi/2$ (veja a Fig. 5.6).

O segundo divisor de feixe controlado quanticamente faz transcender a dicotomia entre onda e partícula nos estados do q -bit, permitindo que esse seja preparado em uma superposição de ambos. Por exemplo, se a medida sobre o q -bit auxiliar é feita na base $|\pm\rangle$, o estado do sistema é dado por uma superposição $\cos \alpha |p\rangle \pm \sin \alpha |w\rangle$, que é uma superposição sem análogo clássico

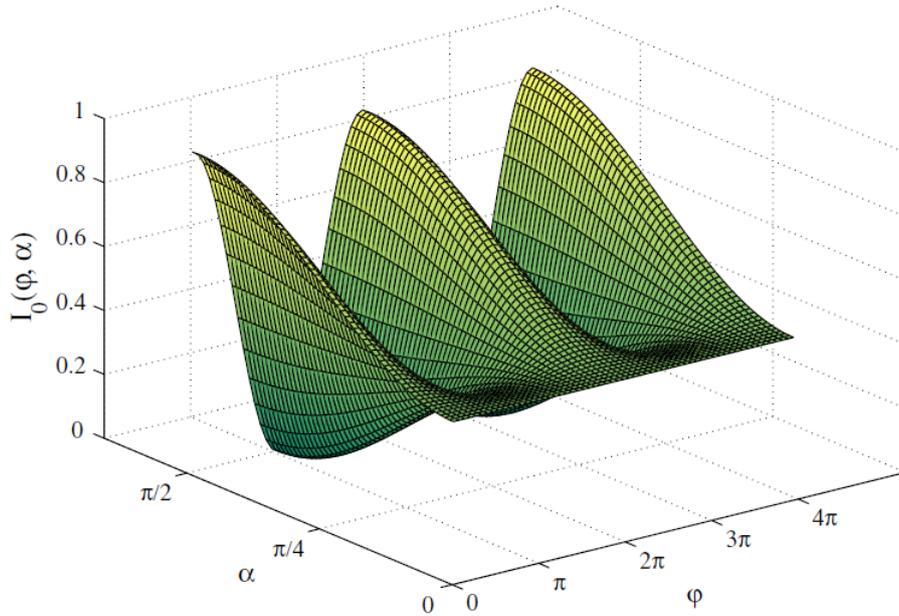


Figura 5.6: Transição suave entre os comportamentos de onda e partícula. Retirado de [24].

e que garante o caráter quântico do sistema.

A introdução do divisor de feixe quântico nos permite excluir modelos de variáveis ocultas nos quais “onda” e “partícula” sejam propriedades realistas do sistema, ou seja, propriedades intrínsecas e independentes de qualquer operação feita sobre o sistema. Caso exista, esse modelo deve satisfazer a duas condições: primeiro, a de que deve reproduzir a estatística prevista pela mecânica quântica e em segundo lugar de que um dado q -bit possua a propriedade de ser uma onda ou partícula intrinsecamente. A segunda hipótese faz com que a não existência desse modelo elimine teorias de variáveis ocultas existentes [141] que tenham noções realistas de onda ou partícula. Na base computacional $A \otimes S = (00, 01, 10, 11)$ a estatística para o sistema conjunto, formado pelos dois q -bits, é dada por

$$p(a, b) = \left(\frac{1}{2} \cos^2 \alpha, \sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\varphi}{2}, \frac{1}{2} \cos^2 \alpha, \sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\varphi}{2} \right). \quad (5.9)$$

Nenhum modelo satisfatório de variáveis ocultas descreve essa estatística e possui ondas ou partículas como propriedades realistas de um q -bit. Pode-se assumir que a fonte emita aleatoriamente ondas e partículas, com alguma probabilidade. No entanto, para que a estatística (5.9) seja obtida, os q -bits exibem um comportamento inconsistente: em um interferômetro aberto ondas obedeceriam a uma estatística associada a partículas, enquanto em um interferômetro fechado partículas exibiriam um padrão de interferência, propriedade característica de ondas. Consequentemente, as propriedades de onda e partícula perdem o sentido. A demonstração desse fato em detalhes faz parte dos resultados dessa tese e é dada no Capítulo seguinte, em

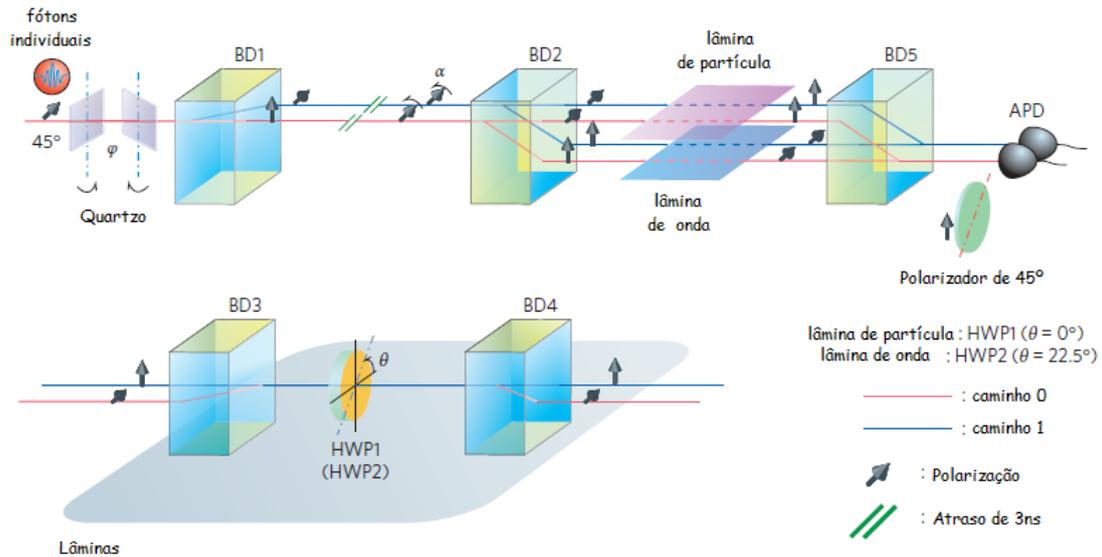


Figura 5.7: Esquema da montagem experimental para o experimento de escolha retardada com controle quântico. Acima, o esquema de montagem do interferômetro, com as lâminas de “onda” e “partícula”. No detalhe, o esquema de montagem dessas lâminas. Retirado de [29].

um contexto mais geral, com a presença de ruído branco.

5.3.1 Realização experimental via ótica quântica

Três experimentos foram realizados utilizando fótons individuais, por meio de diferentes montagens experimentais [29–31]. O primeiro usa os graus de liberdade de polarização dos fótons [29] para implementar o circuito dado na Fig. 5.5 (b), e demonstra o caráter quântico do experimento fazendo medidas sobre o q -bit auxiliar em diferentes direções de polarização. O segundo experimento utiliza um circuito fotônico integrado [30], seguido de um teste de violação de desigualdades de Bell para se fazer a diferenciação do estado do sistema para uma mistura clássica. A terceira implementação trata do uso de dois fótons inicialmente emaranhados [31], com um deles passando por um interferômetro de Mach-Zehnder e o outro passa por um modulador eletro-ótico que permite caracterizar o comportamento do fóton que passou pelo interferômetro, se de partícula ou onda.

Implementação de Tang *et al.*

Na implementação realizada por Tang e seus colaboradores [29], os fótons individuais, emitidos pela fonte com polarização bem definida, passam por um interferômetro de Mach-Zehnder, como descrito na Fig. 5.7. O fóton auxiliar passa pelas duas lâminas “onda” ou “partícula”, que fazem parte do controle quântico que coloca o estado dos dois fótons na superposição dada

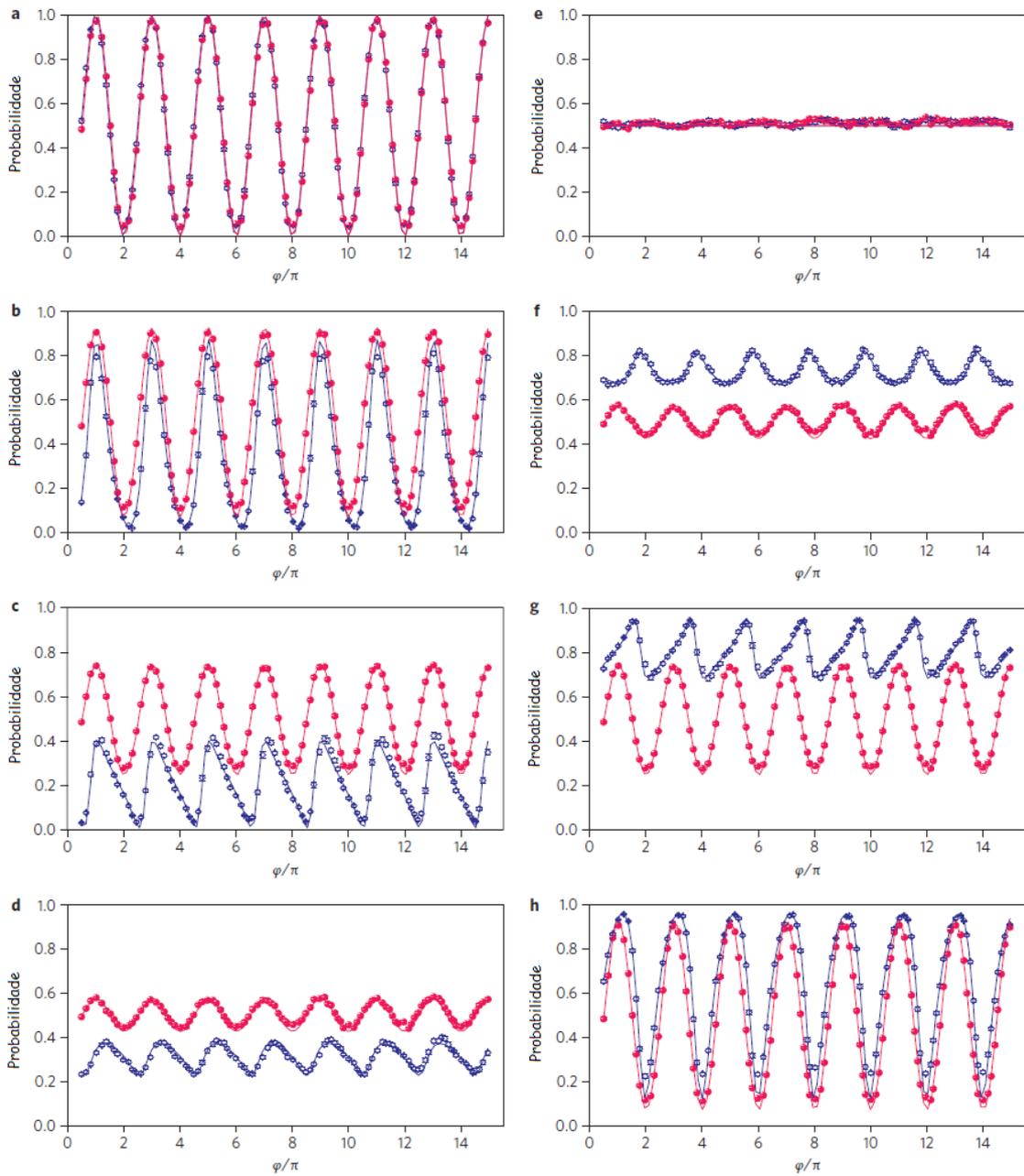


Figura 5.8: Probabilidades de se observar o fóton no detector do caminho 1. De *a* a *h*, o ângulo α varia de $j\pi/8$, com j variando de 0 a 7. Os símbolos vermelhos são os pontos experimentais para a mistura estatística entre os estados de onda e partícula, enquanto os azuis são relacionados à superposição entre esses comportamentos. As linhas representam as curvas esperadas teoricamente. Retirado de [29].

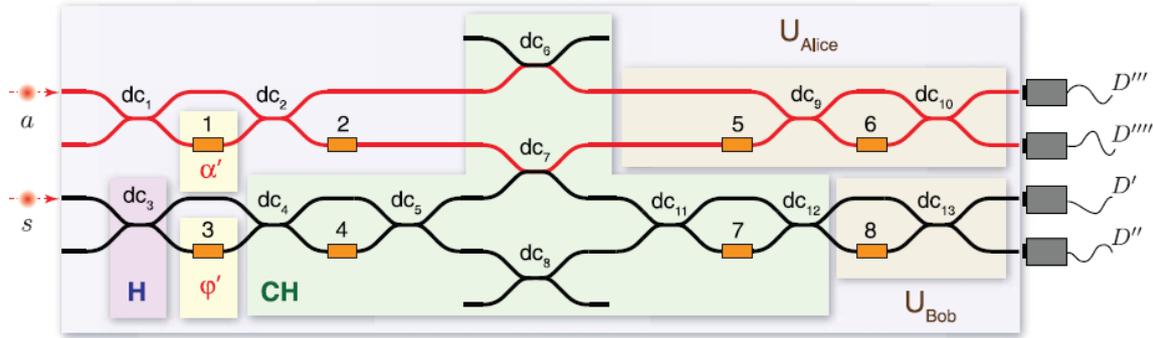


Figura 5.9: Esquema em circuito do dispositivo fotônico integrado usado no experimento. Retirado de [30].

na Eq. (5.7) e podem ser vistas no detalhe da Fig. 5.7. O controle da fase do fóton que passa pelo interferômetro é feito pelas placas de quartzo colocadas antes do primeiro divisor de feixe (BD1). O segundo divisor de feixe (correspondente à segunda Hadamard) no interferômetro fechado é dado por BD3, BD4 e HWP2 (HWP1). Para a lâmina de meia onda na lâmina “onda”, o eixo óptico é ajustado a $22,15^\circ$, o que garante o aparecimento das franjas de interferência e o comportamento como onda do fóton. No caso da lâmina de “partícula”, o eixo óptico é ajustado a 0° e o interferômetro é aberto, com o fóton comportando-se como partícula.

A terceira parte do experimento consiste no controle quântico através das duas lâminas de “onda” e “partícula”. Fótons individuais são preparados com um estado de polarização $|pol\rangle = \cos\alpha|H\rangle + \sin\alpha|V\rangle$ antes de BD2 e passam pelas lâminas de “partículas” e “ondas”, de forma controlada pela polarização desse fóton. As duas lâminas são então combinadas por BD5, com o estado dos fótons dado pela Eq. (5.7). A detecção é feita por contadores de fótons, associados a cada um dos caminhos do interferômetro. Para que uma superposição entre os estados de onda e partícula seja observada, é inserido um polarizador a 45° para que sejam pós-selecionados fótons nos estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$. A comparação na contagem do detector do caminho 1 entre os estados de Eq. (5.7) e uma mistura estatística, dependendo do ângulo de polarização (α) do fóton auxiliar é mostrada na Fig. 5.8. Essa diferença entre os comportamentos de uma mistura clássica e da superposição entre os estados de partícula e onda na Fig. 5.8 mostram o caráter quântico do sistema.

Implementação de Peruzzo *et al.*

A segunda implementação experimental por ótica quântica da proposta de Terno e Ioniciou é devida a Peruzzo e seus colaboradores [30], que utilizaram um dispositivo fotônico integrado e fótons individuais emitidos por conversão paramétrica, inicialmente não emaranhados. Um dos fótons passa pelo interferômetro, representado pelo fóton s na Figura 5.9, enquanto o fóton a controla o segundo divisor de feixe, responsável pelo estado final do sistema (Eq. (5.7)). Para

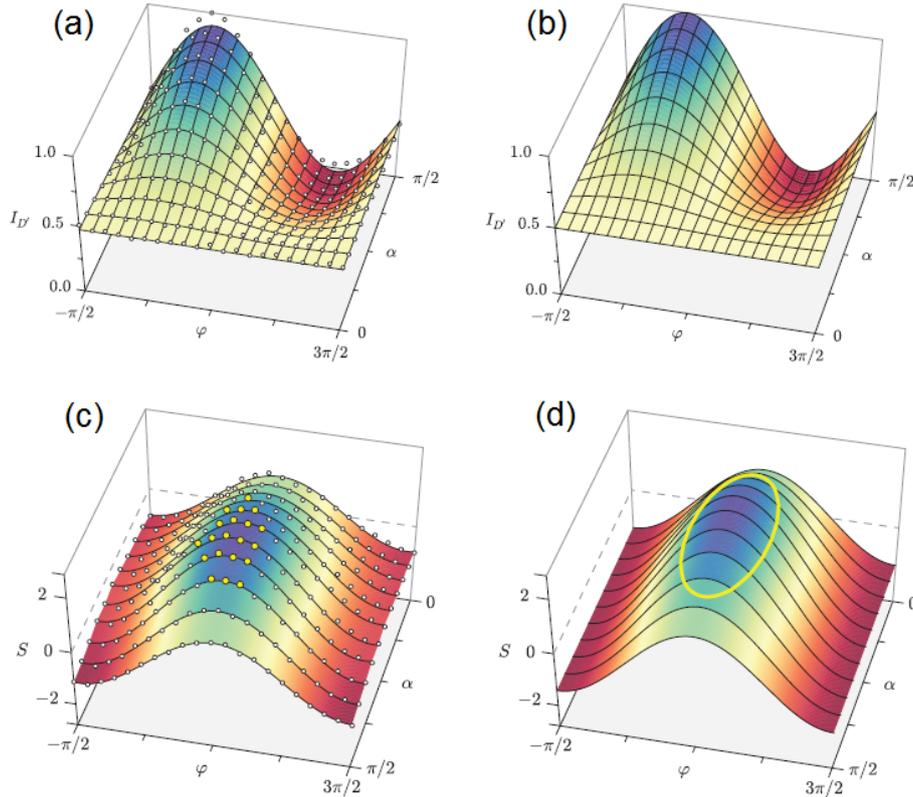


Figura 5.10: Resultados experimentais (a), os pontos brancos são os pontos experimentais, para a transição entre os comportamentos de onda e partícula, comparados com os resultados esperados teoricamente (b). Em (c) e (d), a comparação entre os resultados experimentais (pontos amarelos em (c)) e teóricos (d) para o teste de violação de desigualdade de Bell, com a violação na região em azul nos gráficos. Retirado e adaptado de [30].

se garantir a diferença desse estado para um estado em que o fóton a esteja em uma mistura estatística clássica, eles acoplam o sistema a um teste de violação de desigualdades de Bell.

Em maiores detalhes, o fóton s entra no interferômetro passando pela porta Hadamard (H na Figura), na parte inferior da Fig. 5.9. A fase relativa φ é aplicada entre os dois modos do interferômetro. Então, a Hadamard controlada (CH) é implementada por meio de uma porta Z controlada não-determinística, por meio de dois interferômetros de Mach-Zehnder adicionais. O fóton auxiliar é controlado por um deslocador de fase, que determina o estado quântico do segundo divisor de feixe, em superposição de presente e ausente. Por último, as medidas locais para o teste de violação de desigualdade de Bell são feitas por meio de rotações locais, U_A e U_B , seguida da detecção dos fótons. As portas são implementadas por acopladores direcionais de refletividade $1/2$ ($dc_1 - dc_5$ e $dc_9 - dc_{13}$) e $1/3$ ($dc_6 - dc_8$), além de aquecedores resistivos (retângulos alaranjados), responsáveis pela implementação dos deslocadores de fase [4]. A

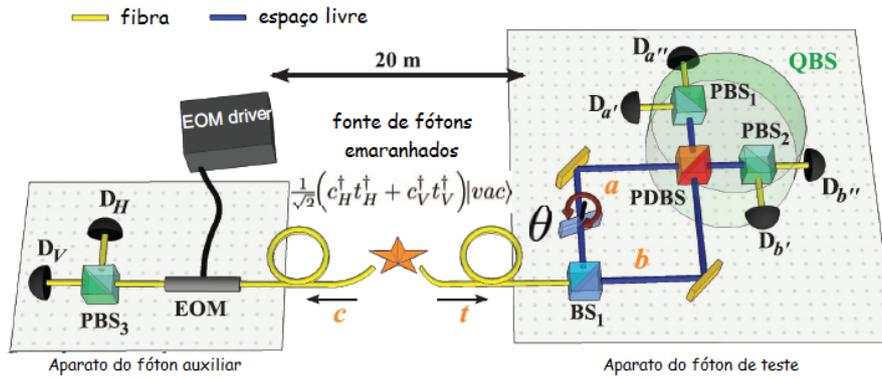


Figura 5.11: Esquema da montagem experimental para a realização do experimento de escolha retardada. No lado esquerdo, o aparato para o fóton auxiliar c , enquanto à direita é mostrado o aparato para o fóton de teste t . Retirado e adaptado de [31].

comparação entre os resultados teóricos e experimentais pode ser vista na Fig. 5.10 (a) e (b), assim como a observação da violação da desigualdade de Bell para o estado da Eq. (5.7), em (c) e (d) da mesma Figura.

A partir da verificação de violação da desigualdade de Bell pelo estado dado em (5.7), é garantido o caráter quântico desse sistema e elimina-se uma possível fuga de detecção da proposta teórica e das realizações experimentais via RMN¹ [27, 28]. Nessa implementação, credita-se a correlação entre o comportamento do fóton s , se como onda ou partícula, e o estado do fóton s ao emaranhamento presente no estado final do sistema, dado por (5.7).

Implementação de Kaiser *et al.*

A última implementação de um experimento de escolha retardada controlado por um dispositivo quântico é devida a Kaiser e seus colaboradores [31]. Nesse experimento, a proposta de Ioniciu e Terno [24] foi alterada, com os dois q -bits inicialmente emaranhados e apenas um deles passando por um interferômetro de Mach-Zehnder, com o q -bit auxiliar controlando o comportamento do q -bit que passa pelo interferômetro, se corpuscular ou ondulatório. O comportamento do q -bit que passa pelo interferômetro só é conhecido após a correlação com o resultado de uma medida feita sobre o q -bit auxiliar. Como na implementação realizada por Peruzzo e seus colaboradores, um teste de violação de desigualdades de Bell é realizado após a passagem dos dois fótons por todo o aparato experimental, para se garantir o caráter quântico desse experimento.

Para realizar experimentalmente essa proposta, uma fonte emitindo fótons individuais com os graus de polarização emaranhados envia um fóton t para um interferômetro de Mach-

¹veja o Capítulo seguinte para uma discussão em detalhes da implementação de [27].

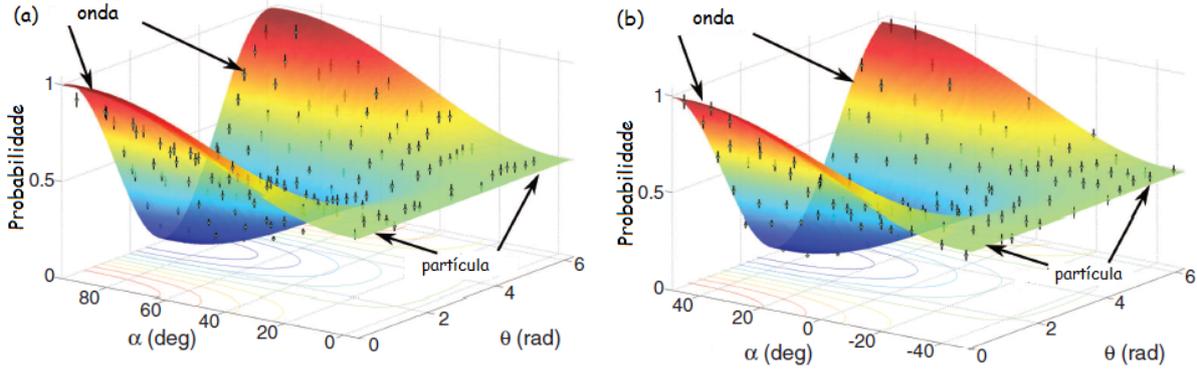


Figura 5.12: Resultados experimentais. Os pontos pretos são os pontos experimentais, com suas respectivas barras de erros. A superfície sólida é a previsão teórica, com a região vermelha indicando a região em que ocorre a violação de desigualdade de Bell. Em (a), a curva para a detecção do fóton c realizada na base $\{H, V\}$, enquanto em (b) é mostrada a curva para a detecção de c na base $\{D, A\}$. Retirado e adaptado de [31].

Zehnder, que é aberto para fótons com polarização horizontal e fechado para fótons verticalmente polarizados (veja a Fig. 5.11). O controle da polarização do fóton t é feito pelo uso de um divisor de feixe dependente de polarização. O segundo fóton c é enviado para outro laboratório, distante $20m$ do primeiro, e utilizado como fóton auxiliar, permitindo a determinação do comportamento do fóton t : se onda, partícula ou uma superposição entre os dois comportamentos.

O divisor de feixe quântico (QBS na Fig. 5.11) é composto de duas partes. A primeira é o divisor de feixe dependente de polarização (PDBS), que reflete totalmente fótons com polarização horizontal e divide o feixe 50/50 para fótons verticalmente polarizados. Esse divisor de feixe especial é obtido a partir da combinação de materiais óticos [142]. Após PDBS, cada estado de polarização do fóton t é associado a um dos comportamentos complementares, onda ou partícula. O segundo estágio do divisor de feixe quântico é a passagem pelos divisores de feixe PBS_1 e PBS_2 , que apagam toda a informação que tenha existido potencialmente na saída de PDBS [143]. Dessa forma, a única forma de se conhecer o comportamento do fóton detectado em um dos detectores $D_{a'}$, $D_{a''}$, $D_{b'}$ e $D_{b''}$ é através de uma medida sobre o fóton c .

O fóton c passa pelo aparato mostrado no lado esquerdo da Fig. 5.11 e consiste de duas partes. Inicialmente, o fóton passa por um modulador eletro-ótico (EOM na Fig. 5.11), que permite o controle da polarização desse fóton, permitindo superposições entre os estados de polarização, $\cos \alpha|H\rangle + \sin \alpha|V\rangle$. Após a passagem do fóton por PBS_3 , o fóton auxiliar é transmitido ($|H\rangle$) ou refletido ($|V\rangle$). Isso projeta o estado do fóton t no estado $\cos \alpha|p\rangle - \sin \alpha|w\rangle$, no caso de um clique em D_H , ou no estado $\sin \alpha|p\rangle + \cos \alpha|w\rangle$, quando o detector D_V é acionado. Escolhendo-se $0 < \alpha < \pi/2$, obtem-se uma mudança contínua entre os comportamentos de onda e partícula do fóton t . Essa transição entre os dois comportamentos é mostrada na

Fig. 5.10, tanto com o fóton auxiliar detectado nas bases $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ e $\{|D\rangle, |A\rangle\}$, em que $|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle)$ e $|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle)$.

Assim como na implementação de Peruzzo, é creditado o caráter quântico desse experimento ao emaranhamento entre os dois fótons, e verificado experimentalmente através de um teste de violação de desigualdade de Bell. Além disso, o emaranhamento é apontado pelos autores como o recurso responsável pela possibilidade de implementação do divisor de feixe com controle quântico e da correlação entre o estado do fóton c com o comportamento do fóton t .

O emaranhamento também é apontado como o recurso principal dos experimentos de Peruzzo e Kaiser por Lloyd [144], como o responsável pela correlação e pela possibilidade de se inverter a ordem das medidas do fóton auxiliar e do fóton que passa pelo interferômetro nesses dois experimentos. No entanto, na Seção 6.2 é mostrado que essa correlação é robusta à presença de ruído branco, mesmo em níveis em que não exista a presença de emaranhamento no sistema, como no caso de RMN, por exemplo.

Capítulo 6

Resultados II: realização, via RMN, da versão quântica do experimento de escolha retardada

Nesse Capítulo são discutidos os dois resultados ligados à proposta de Ioniciu e Terno para uma versão quântica do experimento de escolha retardada [24]. Inicialmente, é discutida a implementação experimental, anterior às realizações via ótica quântica discutidas no último Capítulo, dessa proposta utilizando as técnicas de RMN [27]. Feita essa discussão, é demonstrada explicitamente a robustez quanto à presença de ruído branco das correlações entre o estado do q -bit auxiliar e o comportamento do q -bit que passa pelo interferômetro, se de onda ou partícula [33]. Além disso, é demonstrada a incompatibilidade de modelos de variáveis ocultas que possuam noções realistas de onda ou partícula, mesmo no caso em que o sistema está em contato com um ambiente com uma quantidade arbitrária de ruído branco.

6.1 Realização experimental da versão quântica do experimento de escolha retardada

Nessa Seção, utilizando as técnicas de RMN, é estudada experimentalmente a versão quântica do experimento de escolha retardada, proposta por Ioniciu e Terno [24] (veja a Seção 5.3 do Capítulo anterior). Como já discutido, nessa proposta o segundo divisor de feixe de um interferômetro de Mach-Zehnder, como na Fig. 6.1, está em uma superposição de estar ausente e presente. Em outras palavras, o interferômetro está em uma superposição de estar aberto e fechado. Essa superposição leva o q -bit que passa pelo interferômetro a uma superposição entre onda e partícula. Os resultados experimentais obtidos mostram bom acordo com a teoria

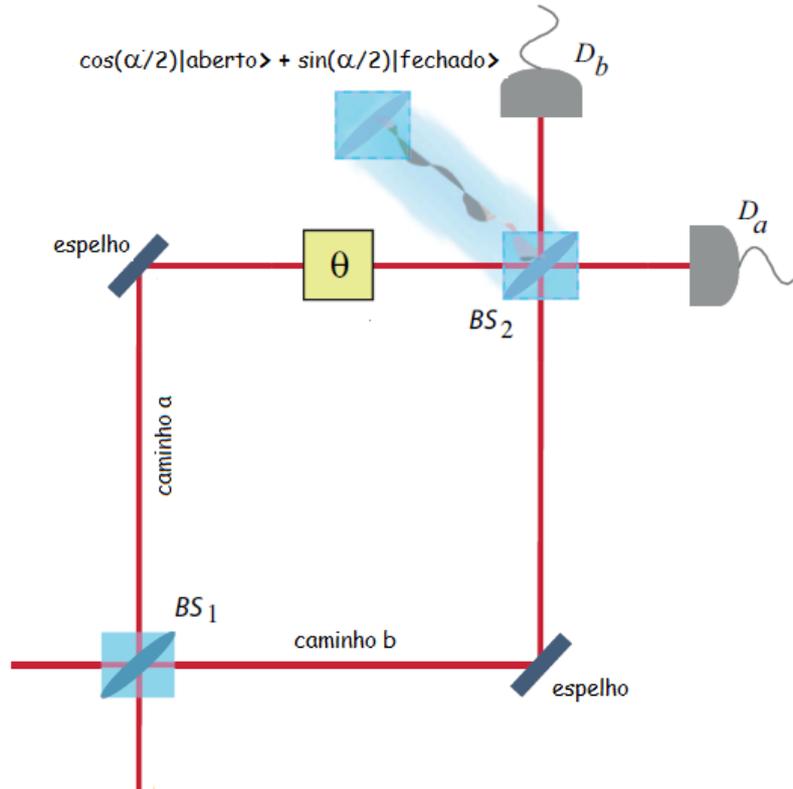


Figura 6.1: Interferômetro de Mach-Zehnder com BS_2 em superposição de estar ausente e presente. Retirado e adaptado de [27].

e mostram que, contrário ao princípio de complementaridade, é possível a observação dos comportamentos de onda e partícula de um sistema utilizando um mesmo aparato experimental. Esse fato é uma consequência da natureza quântica do dispositivo que controla o sistema quântico, o segundo divisor de feixe nesse caso (como mostrado na Fig. 6.1).

A ideia, como discutido na Seção 5.3, é a seguinte: o experimento de escolha retardada clássica pode ser implementado utilizando um gerador de números aleatórios quântico [14], como discutido na Seção 5.2.1. Esse gerador pode ser realizado utilizando-se um q -bit auxiliar A em estado de superposição uniforme e medido após o q -bit do sistema S passar o primeiro divisor de feixe. A saída da medida sobre A (0 ou 1) define se o interferômetro está aberto ou fechado [14]. Na versão quântica, esse controle clássico é substituído por um controle quântico, antes da medida sobre o q -bit auxiliar [24]. Os dois comportamentos podem ser observados a partir da correlação entre os resultados das medidas sobre A e S .

A transformação empregada por BS_2 é controlada coerentemente pelo q -bit auxiliar de forma que, se esse q -bit é medido no estado $|0\rangle_A$, BS_2 está ausente (o interferômetro é aberto) e o estado final é $|0\rangle_A|p\rangle_S$ com $|p\rangle_S = (|0\rangle_S + e^{i\theta}|1\rangle_S)/\sqrt{2}$, representando o comportamento de partícula do q -bit S . Por outro lado, se o estado de A é dado por $|1\rangle_A$, BS_2 está presente (o interferômetro fechado) e o estado final é $|1\rangle_A|w\rangle_S$ em que $|w\rangle_S = e^{i\theta/2}(\cos(\theta/2)|0\rangle_S - i\sin(\theta/2)|1\rangle_S)$,

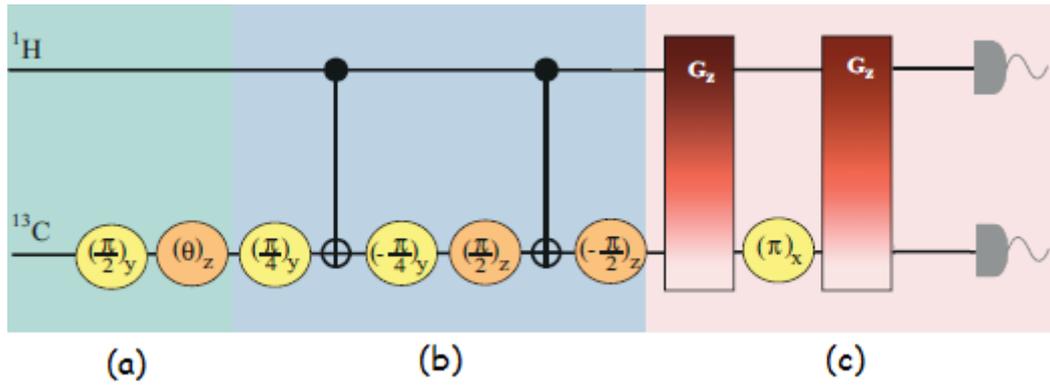


Figura 6.2: Esquema para a sequência de operações realizadas no experimento de escolha retardada. No primeiro bloco (a), o estado inicial é preparado e a superposição do estado de S é criada. No segundo bloco (b), temos a sequência de operações para a implementação da porta Hadamard controlada. O último bloco (c) é a medição forte não seletiva feita sobre o q -bit auxiliar. Retirado e adaptado de [27].

ligado ao comportamento ondulatório de S . O q -bit auxiliar também pode ser preparado em uma superposição da forma $\cos(\alpha/2)|0\rangle_A + \sin(\alpha/2)|1\rangle_A$, nesse caso, após BS_2 , obtemos o estado [24] (Eq. (5.7):

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |0\rangle_A |p\rangle_S + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |1\rangle_A |w\rangle_S. \quad (6.1)$$

Esse cenário é completamente diferente do caso de informação parcial das quantidades complementares discutida por Englert em [145], no qual uma interação fraca com o interferômetro permite a obtenção de informação incompleta sobre essas quantidades. Nesse mesmo trabalho foi apresentada uma desigualdade que limita a informação máxima que pode ser obtida simultaneamente sobre os dois comportamentos, padrões de interferência e informação de caminho. Nesse caso se tem o conhecimento completo sobre as duas propriedades, deixando o q -bit em uma superposição de ambos os comportamentos [24].

O experimento foi realizado utilizando espectroscopia por RMN de estado líquido com uma amostra de CHCl_3 , marcada com ^{13}C e que contém dois spins $1/2$. A amostra foi preparada misturando-se 50 mg de CHCl_3 99 % em uma solução de 0,7 ml de acetona deuterada a 99% em um tubo de 5 mm. A amostra de clorofórmio enriquecido foi fornecida por Cambridge Isotope Laboratories - Inc. Os experimentos foram feitos a temperatura ambiente (25°C), em um espectrômetro Varian 500 MHz Premium Shielded e uma sonda de dupla ressonância de 5mm, equipada com bobinas de gradiente, instalados no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

A Fig. 6.2 mostra o circuito para o procedimento experimental. O q -bit representado pelo spin nuclear do Hidrogênio exerce o papel de q -bit auxiliar, enquanto o spin do carbono representa o q -bit S . O primeiro bloco da Fig. 6.2 executa a preparação de estados inicial e cria a superposição do estado de S . O estado pseudo-puro inicial $|00\rangle_{A,S}$ é preparado aplicando-se

a sequência de pulsos de radiofrequência e gradientes de campo dada na Seção 2.4 do Capítulo 2. Após a preparação do estado inicial, uma rotação $(\alpha)_y^H$ é aplicada sobre o ^1H , para que o estado $\cos(\alpha/2)|0\rangle_A + \sin(\alpha/2)|1\rangle_A$ do q -bit auxiliar seja preparado. Uma porta pseudo-Hadamard, $(\pi/2)_y^C$, é aplicada ao ^{13}C , criando a superposição $(|0\rangle_S + |1\rangle_S)/\sqrt{2}$. A diferença de fase é introduzida por uma rotação de θ na direção z , aplicada também sobre o núcleo de carbono. No segundo bloco da Fig. 6.2, o controle quântico do interferômetro é implementado por meio de uma porta Hadamard controlada [146], decomposta em quatro rotações e duas portas CNOT, como mostrado na Fig. 6.2. O terceiro bloco do procedimento experimental é a parte de medida forte na base de autoestados de σ_z sobre o q -bit auxiliar [76, 82] (veja a Subseção 2.5.4 no Capítulo 2). Após o último bloco, a informação sobre a natureza corpuscular ou ondulatória do q -bit pode ser obtida a partir de uma tomografia de estado parcial dos spins nucleares.

A medida forte é implementada da seguinte maneira: a sequência da Fig. 6.2 leva à perda de coerência do spin de ^1H pela aplicação de pulsos e gradientes de campo. A coerência do spin de ^{13}C é protegida pelo pulso $(\pi)_x^{13\text{C}}$, que refocaliza sua coerência. Esse procedimento implementa a medida forte na direção z , já que a matriz densidade do sistema é exatamente a mesma obtida em um ensemble de medidas projetivas na direção z sobre o q -bit auxiliar.

Empregando essa medida forte sobre o q -bit auxiliar, obtemos a seguinte matriz desvio

$$\begin{aligned} \Delta\rho_Z \propto & \frac{\mathbb{1} + \sigma_z^A}{2} \otimes \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 |p\rangle_S \langle p| + \\ & + \frac{\mathbb{1} - \sigma_z^A}{2} \otimes \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 |w\rangle_S \langle w|. \end{aligned} \quad (6.2)$$

A matriz desvio na Eq. (6.2) é uma matriz diagonal por blocos, em que cada bloco contém a informação sobre o comportamento ondulatório ou corpuscular do sistema. Como RMN lida com um ensemble de moléculas, não é possível a realização de uma medida e a subsequente pós-seleção dos resultados. No entanto, é possível se implementar uma medida forte não seletiva sobre o sistema a partir de uma dinâmica não-unitária. Seguindo a dinâmica de apenas um elemento da matriz desvio (6.2), pode-se emular a pós-seleção de um dado resultado para a medida do q -bit auxiliar. Nota-se que não é necessária a tomografia completa do estado para se explorar os aspectos da complementaridade entre onda e partícula de um spin. Isso pode ser feito seguindo-se a dinâmica de apenas um elemento da matriz desvio: aquele que representa a população do estado inicial do interferômetro.

Na Fig. 6.3 pode ser observada a transição contínua, em função do parâmetro α , do comportamento ondulatório (a oscilação em função de θ) para o comportamento característico de partícula (a probabilidade constante em função de θ). Esses dois aspectos complementares podem ser observados nesse único arranjo experimental a partir de medidas da magnetização dos spins nucleares.

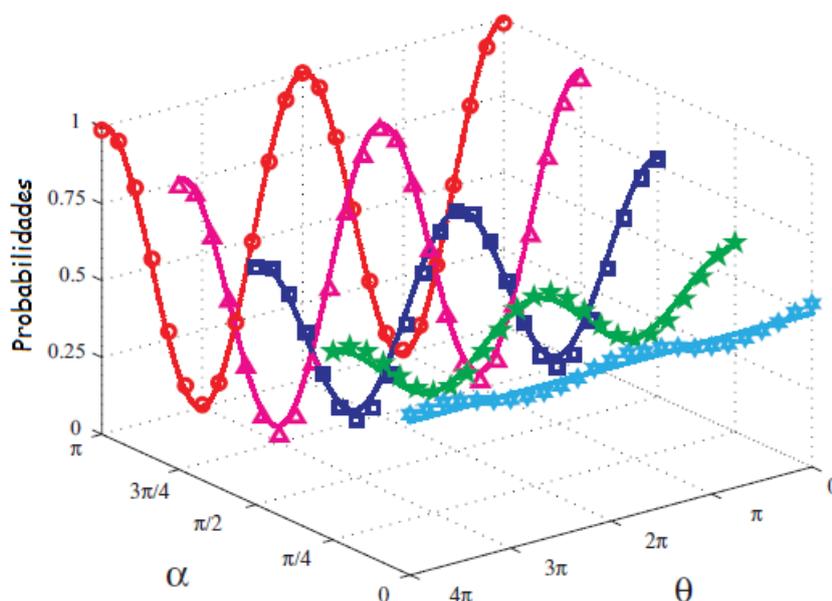


Figura 6.3: Probabilidade de se detectar o estado inicial, $Tr(\Delta\rho|10)_{A,S}\langle 10|$. Os pontos representam os pontos experimentais e as linhas são as curvas esperadas teoricamente. Retirado e adaptado de [27].

Resumindo, implementamos a versão quântica do experimento de escolha retardada de Wheeler, proposto teoreticamente por Ioniciu e Terno [24]. Os resultados obtidos estão em acordo com as previsões teóricas e revelam novos e importantes aspectos do princípio de complementaridade de Bohr. Uma reinterpretação desse princípio se faz necessária, já que os resultados exibidos na Fig. 6.3 mostram que é possível se preparar um sistema em uma superposição dos aspectos de onda e partícula. Esse fato permite que sejam observados os comportamentos de onda e partícula com o mesmo aparato experimental, já que temos um dispositivo capaz de controlar de forma coerente a interferência entre os dois caminhos do interferômetro. Esse fato é contraditório com a afirmação original do princípio de complementaridade. Além disso, isso nos força a descartar os comportamentos de onda e partícula como propriedades realistas do sistema [24], como mostraremos na próxima Seção.

6.2 Dualidade onda-partícula em um ambiente com ruído branco arbitrário

A introdução do controle quântico na proposta de Ioniciu e Terno [24] possui duas consequências principais. A primeira delas é a de que o experimentador pode medir o q -bit auxiliar após a detecção do q -bit que passa pelo interferômetro (sistema). Os comportamentos de onda ou partícula são obtidos pela correlação entre os dados experimentais para as medidas

sobre o q -bit auxiliar e sobre o sistema. A complementaridade não está mais nos arranjos experimentais, já que apenas um aparato experimental é utilizado, mas nas correlações entre os dados experimentais [24, 27–31]. Essa propriedade do sistema permite uma transição suave entre os comportamentos de onda e partícula do sistema. A segunda consequência, talvez a mais importante, é a demonstração de que, no caso de estados puros, não existe um modelo de variáveis locais que reproduza a distribuição de probabilidades obtida do estado dado na Eq. (6.1), em que os comportamentos de onda ou partícula do sistema sejam propriedades realísticas do sistema, ou seja, propriedades intrínsecas e que não variam no tempo [24].

A proposta de Wheeler elimina uma possível relação causal entre o comportamento do q -bit, se de onda ou partícula, com a escolha do aparato experimental a ser utilizado. No entanto, ainda persiste a complementaridade entre os dois aparatos experimentais, ou o interferômetro está aberto, o que leva a um comportamento de partícula, ou está fechado, o que implica em um comportamento ondulatório. Isso implica que uma visão realística dos q -bits ainda pode ser obtida, já que os q -bits comportam-se como ondas ou como partículas durante todo o tempo. Ou seja, ainda existe um modelo de variáveis ocultas, em que os comportamentos de onda e partícula sejam definidos de forma realista. Na versão quântica desse experimento, o segundo divisor de feixe está em superposição de ausente e presente durante todo o tempo. Assim, surge a pergunta sobre a existência de um modelo de variáveis ocultas que reproduza a estatística obtida experimentalmente e que possua noções realistas de onda ou partícula, ou seja, de que são ligados a propriedades intrínsecas dos q -bits e que não variam no tempo [24].

Fenômenos quânticos são apontados como recursos importantes para tarefas de computação e comunicação [41]. Sob um ponto de vista prático, é importante se conhecer o quanto a presença de ruído afeta a coerência do sistema. Nessa Seção analizaremos como a presença de ruído influencia a versão quântica do experimento de escolha retardada e mostraremos que a dualidade onda-partícula não pode ser explicada em termos clássicos. Um outro aspecto importante é ligado ao papel do emaranhamento nesse experimento, já que o estado dado em (6.1) apresenta emaranhamento para todos os valores de α , exceto os extremos.

Os estados $|0\rangle_S$ e $|1\rangle_S$ são utilizados para se rotular os braços b e a do interferômetro, respectivamente. A transformação aplicada pelo segundo divisor de feixe é controlada coerentemente pelo sistema auxiliar \mathcal{A} . Se \mathcal{A} está no estado $|0\rangle_{\mathcal{A}}$ o segundo divisor de feixe é ausente, o que significa que o interferômetro está aberto. Enquanto se seu estado for $|1\rangle_{\mathcal{A}}$, \mathcal{BS}_q está presente e o interferômetro fechado. Como \mathcal{BS}_q agora é um sistema quântico, seu estado não é limitado a presente ou ausente, já que pode estar em qualquer superposição de $|0\rangle_{\mathcal{A}}$ e $|1\rangle_{\mathcal{A}}$. Ou seja, o interferômetro pode estar em uma superposição arbitrária de estar aberto e fechado [24]. O estado final (6.1), é dado por

$$|\psi\rangle = \cos \alpha |p\rangle_S |0\rangle_{\mathcal{A}} + \sin \alpha |w\rangle_S |1\rangle_{\mathcal{A}}. \quad (6.3)$$

Inicialmente, a presença de um ambiente com ruído branco faz com que o estado do sistema seja dado pelo estado de Werner [147] da forma

$$\rho_{\mathcal{S}\mathcal{A}} = \eta \mathbb{1}_{\mathcal{S}\mathcal{A}} + \varepsilon \sigma_{\mathcal{S}\mathcal{A}}, \quad (6.4)$$

no qual $\eta = (1 - \varepsilon)/4$, com ε quantificando a pureza do estado e $\sigma_{\mathcal{S}\mathcal{A}}$ é a matriz densidade associada ao estado puro dado na Eq. (6.1). Quando $\varepsilon = 1$ recuperamos o caso em que o estado é puro, com a distribuição de probabilidades dada em (6.7). No entanto, para qualquer outro valor de ε , temos um estado misto como estado de entrada do sistema.

Para o estado da eq. (6.4), a probabilidade de detecção do q -bit no detector D_b é dada por $I_b(\alpha, \varphi) = \text{Tr}(\rho|0\rangle\langle 0|)$, em que $\rho_1 = \text{Tr}_{\mathcal{A}}(\rho_{\mathcal{S}\mathcal{A}}) = \frac{1-\varepsilon}{2}\mathbb{1} + \varepsilon(\cos^2 \alpha|p\rangle + \sin^2 \alpha|w\rangle\langle w|)$. Nesse caso, temos então

$$I_b(\alpha, \varphi) = \frac{1 - \varepsilon}{2} + \varepsilon \left(\cos^2 \alpha \frac{1}{2} + \sin^2 \alpha \cos^2 \left(\frac{\varphi}{2} \right) \right). \quad (6.5)$$

Como pode-se ver diretamente dessa equação, a transição suave entre os comportamentos de onda e partícula é observada mesmo na presença de ruído branco. Um padrão de interferência com visibilidade dada por $\mathcal{V} = \varepsilon \sin^2 \alpha$ é observado. Caso as medidas sobre o q -bit auxiliar e sobre o sistema sejam correlacionadas, temos um comportamento de partícula quando o q -bit auxiliar é medido em $|0\rangle$, com probabilidades iguais de detecção em D_a e D_b . Caso o resultado da medida seja o estado $|1\rangle$, observa-se um padrão de interferência com visibilidade

$$\mathcal{V} = \frac{\varepsilon \sin^2 \alpha}{(1 - \varepsilon)/2 + \varepsilon \sin^2 \alpha}. \quad (6.6)$$

Ou seja, a correlação entre o estado do q -bit auxiliar e o comportamento do sistema é robusta à presença de ruído branco no sistema, mesmo no caso em que não haja emaranhamento no sistema. Esse fato é experimentalmente observado em [27, 28] (Seção anterior), nos quais $\varepsilon \approx 10^{-5}$ e não há emaranhamento [100] (veja a Seção 3.2.1 do Capítulo 3). Para se distinguir esse caso de uma situação em que o estado do q -bit auxiliar encontra-se inicialmente em uma mistura do tipo $\rho'_A = \cos^2 \alpha|0\rangle\langle 0| + \sin^2 \alpha|1\rangle\langle 1|$, basta notar que a probabilidade de detecção I_b depende da base em que é feita a medida sobre o q -bit auxiliar no caso em que o estado é dado por (6.4), enquanto I_b é invariante a mudança na base de detecção do q -bit auxiliar no caso em que esse q -bit encontra-se inicialmente no estado ρ'_A .

Na base computacional $\{00, 01, 10, 11\}$ no espaço $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$, a distribuição de probabilidade de \mathcal{S} e \mathcal{A} é dada por [24]

$$P(\mathcal{S}, \mathcal{A}) = \left[\frac{1}{2} \cos^2 \alpha, \sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\phi}{2}, \right]$$

$$\frac{1}{2} \cos^2 \alpha, \sin^2 \alpha \sin^2 \frac{\phi}{2}]. \quad (6.7)$$

em que $S \in \mathcal{S}$ e $A \in \mathcal{A}$ são os resultados das medidas na base computacional.

Para demonstrarmos que a dualidade onda-partícula não pode ser descrita por um modelo de variáveis ocultas local, mesmo na presença de ruído branco, consideramos a estatística obtida na base computacional para o estado dado na Eq. (6.4). Relembrando que todo o interferômetro é uma operação unitária, a distribuição de probabilidade de \mathcal{S} e \mathcal{A} é dada por

$$\begin{aligned} P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A}) &= \text{Tr} \left[U_I \rho_{\mathcal{S}\mathcal{A}} U_I^\dagger \hat{P}_{\mathcal{S}\mathcal{A}} \right] \\ &= \eta + \varepsilon P(\mathcal{S}, \mathcal{A}), \end{aligned} \quad (6.8)$$

em que $\hat{P}_{\mathcal{S}\mathcal{A}} = |\mathcal{S}\rangle \otimes |\mathcal{A}\rangle \langle \mathcal{S}| \otimes \langle \mathcal{A}| \equiv |\mathcal{S}\mathcal{A}\rangle \langle \mathcal{S}\mathcal{A}|$ é um projetor, na base computacional, sobre o espaço $\mathcal{S}\mathcal{A}$, $P(\mathcal{S}, \mathcal{A})$ é dado na Eq. (6.7) e U_I é o operador unitário que descreve a evolução de $\rho_{\mathcal{S}\mathcal{A}}$ no interferômetro.

Na sequência, mostraremos que, independente do valor de ε , não existe um modelo de variáveis local que descreva a estatística dada na Eq. (6.8), como observado nos experimentos de [27, 28].

Seguindo a proposta da Ref. [24], assumimos que cada q -bit apresente comportamento corpuscular ou ondulatório, com esses dois comportamentos determinados de forma unívoca por uma variável oculta dicotômica. Essa variável oculta é determinada exclusivamente pela fonte dos q -bits e determina o comportamento dos q -bits de forma totalmente independente do aparato experimental. Em outras palavras, assumimos que existe uma variável oculta λ que determina o comportamento de partícula ($\lambda = p$) ou de onda ($\lambda = w$) do q -bit. Nesse caso, p e w podem representar valores distintos de uma variável ou conjunto de variáveis. Nesse modelo, a distribuição de probabilidades experimental $P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A})$ é a distribuição marginal de uma distribuição envolvendo λ , $P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A}) = \sum_\lambda P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A}, \lambda)$. Pela regra de Bayes, essa distribuição pode ser reescrita na forma mais conveniente

$$P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A}) = \sum_\lambda P_\varepsilon(\mathcal{S}|\mathcal{A}, \lambda) P_\varepsilon(\mathcal{A}|\lambda) P_\varepsilon(\lambda), \quad (6.9)$$

em que $P(X|Y)$ é a probabilidade condicional de X dado Y .

O próximo passo é a definição de todas as distribuições desconhecidas necessárias para se calcular $P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A}, \lambda)$:

- A distribuição de probabilidades da variável oculta

$$P_\varepsilon(\lambda) = [a, 1 - a], \quad (6.10)$$

na qual a é a probabilidade de λ assumir o valor p e $(1 - a)$ para o valor w .

- As probabilidades condicionais

$$\begin{aligned} P_\varepsilon(\mathcal{A}|\lambda = p) &= [b, 1 - b] \\ P_\varepsilon(\mathcal{A}|\lambda = w) &= [c, 1 - c]. \end{aligned} \quad (6.11)$$

- O comportamento de um q -bit do tipo onda ($\lambda = w$) em um interferômetro aberto ($\mathcal{A} = 0$) é desconhecido. Portanto

$$P_\varepsilon(S|\mathcal{A} = 0, \lambda = w) = [d, 1 - d]. \quad (6.12)$$

O mesmo ocorre para o comportamento de um q -bit tipo partícula em um interferômetro fechado ($\mathcal{A} = 1$)

$$P_\varepsilon(S|\mathcal{A} = 1, \lambda = p) = [e, 1 - e]. \quad (6.13)$$

As demais distribuições podem ser calculadas diretamente de $P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A}, \lambda)$, dada na Eq. (6.8), como distribuições marginais.

- Para o q -bit auxiliar temos $P_\varepsilon(\mathcal{A}) = \sum_S P_\varepsilon(\mathcal{S}, \mathcal{A})$, o que leva a

$$P_\varepsilon(\mathcal{A}) = [2\eta + \varepsilon \cos^2 \alpha, 2\eta + \varepsilon \sin^2 \alpha], \quad (6.14)$$

sujeito aos vínculos

$$P_\varepsilon(\mathcal{A}) = \sum_\lambda P_\varepsilon(\mathcal{A}|\lambda) P_\varepsilon(\lambda) \quad (6.15)$$

- O comportamento de um q -bit tipo partícula em um interferômetro aberto ($\mathcal{A} = 0$ e $\lambda = p$) e de um q -bit tipo onda em um interferômetro fechado ($\mathcal{A} = 1$ e $\lambda = w$) são dados por

$$P_\varepsilon(\mathcal{S}|\mathcal{A} = 0, \lambda = p) = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right]. \quad (6.16)$$

e

$$P_\varepsilon(\mathcal{S}|\mathcal{A} = 1, \lambda = w) = \frac{1}{p_1} \left[\eta + \varepsilon \cos^2 \frac{\phi}{2} \sin^2 \alpha, \eta + \varepsilon \sin^2 \frac{\phi}{2} \sin^2 \alpha \right], \quad (6.17)$$

respectivamente. Na última equação, temos $p_1 > 0$ para qualquer ε positivo, já que α deve ser real.

Na última equação, $p_1 \equiv p_{\mathcal{A}=1} = 2\eta + \varepsilon \sin^2 \alpha$ é a probabilidade de se medir \mathcal{A} no estado $|1\rangle_{\mathcal{A}}$.

Substituindo as distribuições acima na Eq. (6.9), sujeita ao vínculo (6.15), obtemos o seguinte conjunto de equações

$$c(1-a) \left(d - \frac{1}{2} \right) = 0, \quad (6.18)$$

$$a(1-b)(e-\beta) = 0, \quad (6.19)$$

$$ab + c(1-a) - p_0 = 0, \quad (6.20)$$

em que foi feita a definição

$$\beta = \frac{\eta + \varepsilon \cos^2(\phi/2) \sin^2 \alpha}{1 - p_0} \quad (6.21)$$

e $p_0 = 1 - p_1$.

Se esse conjunto de equações não apresentar nenhuma solução válida, somos levados a concluir que não existe um modelo de variáveis ocultas local que descreva a probabilidade observada e que apresente noções realistas de onda e partícula, já que a Eq. (6.9) não é satisfeita.

Como α e β são arbitrários, temos de descartar as soluções triviais ($a = 0, c = 0$) e ($a = 1, b = 1$), que implicam em $p_0 = 0$ e $p_1 = 0$, respectivamente.

A solução $d = 1/2$ implica que, em um interferômetro aberto, q -bits tipo onda apresentam estatística correspondente a q -bits tipo partícula,

$$P_\varepsilon(\mathcal{S}|A = 0, \lambda = w) = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right], \quad (6.22)$$

o que contraria a hipótese de realismo desses dois comportamentos. Logo, essa solução deve ser descartada. Um comentário sobre altos níveis de ruído se faz necessário aqui. Na Eq. (6.17) temos q -bits tipo onda apresentando estatística correspondente a partículas em um interferômetro fechado no caso em que $\varepsilon = 0$. No entanto, apenas nesse caso, $\rho_{\mathcal{S}\mathcal{A}}$ é igual à identidade e, como o interferômetro é uma operação unitária, nada ocorre com o sistema.

A solução $e = \beta$ implica que

$$P_\varepsilon(\mathcal{S}|A = 1, \lambda = p) = [\beta, 1 - \beta]. \quad (6.23)$$

Como β depende de ϕ para qualquer $\varepsilon > 0$, essa solução implica que q -bits tipo partícula, em um interferômetro fechado, apresentam comportamento ondulatório (veja a Eq. (6.17)), o que também é contrário à hipótese de realismo dos dois comportamentos.

A última solução, $c = 0$ e $b = 1$, implica em $a = p_0$. Isso significa que os q -bits são distribuídos aleatoriamente como $P_\varepsilon(\lambda) = [p_0, 1 - p_0]$, que é a mesma distribuição de $P_\varepsilon(\mathcal{A})$. A variável oculta λ e o q -bit auxiliar \mathcal{A} são perfeitamente correlacionados, o que implica que a variável oculta seria determinada pela escolha do experimentador para o valor de α . Portanto,

pela navalha de Occam, essa solução também deve ser descartada, já que se λ determina completamente o valor do q -bit auxiliar, então ele não pode ser determinado pela escolha do parâmetro α , feita pelo experimentador na preparação de \mathcal{A} .

Esse resultado implica que, para qualquer $\varepsilon > 0$, a distribuição de probabilidade dada na Eq. (6.8) não pode ser explicada por um modelo de variáveis ocultas locais em que os comportamentos de onda e partícula sejam propriedades físicas de um sistema quântico.

No caso do estado puro, o estado dado na Eq. (6.1) é emaranhado para $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$. O emaranhamento entre o sistema e o q -bit auxiliar, detectado por testes de violação de desigualdade de Bell, foi utilizado em [30,31] como uma prova do caráter quântico do interferômetro. Por outro lado, consideramos aqui o estado descrito pela Eq. (6.1) na presença de ruído branco, ou seja, o estado de Werner dado na Eq.(6.4). Para $\varepsilon < 1/3$, esse estado é separável para qualquer α [100]. Aqui demonstramos que a prova dada em [24] pode ser estendida também para estados de Werner com $\varepsilon > 0$ arbitrário. Esse resultado indica que o emaranhamento entre o sistema e o q -bit auxiliar não é o recurso principal para a ausência de um modelo clássico que reproduza a distribuição prevista pela mecânica quântica. Além disso, isso indica que o emaranhamento não está relacionado à correlação entre o estado do q -bit auxiliar e o comportamento do sistema, se como partícula ou onda, já que essa correlação é robusta mesmo com um nível arbitrário de ruído branco.

Os experimentos nas Refs. [27,28] (veja a Seção anterior) são realizados via métodos de RMN, que são sistemas experimentais sujeitos a um alto nível de ruído. É um fato bem conhecido que nesses sistemas não é possível criar emaranhamento [100] (veja a Seção 3.2.1 do Capítulo 3), mas é possível aplicar portas não-fatoráveis que criam correlações quânticas (de estados separáveis) entre o sistema e o q -bit auxiliar, mesmo na presença de um alto nível de ruído ($\varepsilon \ll 1$) [148–150]. A possibilidade de se executar esse tipo de portas permite a implementação da versão quântica do experimento de escolha retardada. Também é um fato bem conhecido que transformações unitárias não-fatoráveis não possuem uma descrição realística local eficiente, já que precisam de um número exponencialmente grande de variáveis ocultas [104] (veja a Seção 3.2.2, do Capítulo 3). Apesar das correlações entre as orientações relativas dos spins nesses experimentos poderem ser explicadas a partir de um modelo realístico local [104], a dualidade onda partícula não pode ser explicada da mesma forma.

Para se descrever essa dualidade de forma clássica, um conjunto infinito de variáveis ocultas se faz necessário, mesmo na presença de altos níveis de ruído. Pela navalha de Occam, escolhemos a descrição mais simples dada pela mecânica quântica. Esse resultado mostra que o mesmo nível de conspiração de variáveis ocultas obtido na Ref. [24] também é obtido em uma situação na ausência de emaranhamento. Esse resultado deixa o resultado tanto mais abrangente quanto experimentalmente mais relevante, particularmente com base nas discussões apresentadas em [30,31], que apontam para uma possível fuga de detecção no experimento. É

importante notar que, para $\varepsilon = 0$, a Eq. (6.9) possui uma solução. Mas, nesse caso, a ação de uma transformação unitária não-fatorável não pode ser distinguida de rotações locais, o que leva à indistinguibilidade entre os q -bits tipo partícula e tipo onda.

Resumindo, foi demonstrado que a distribuição dada na Eq. (6.8) - verificada experimentalmente em [27–31] - exclui os comportamentos de onda e partícula de um sistema quântico individual como propriedades realistas, mesmo na presença de um alto nível de ruído branco. Esse resultado implica que a dualidade onda-partícula não pode ser explicada classicamente.

6.3 Conclusões

Nesse Capítulo, implementamos a versão quântica do experimento de escolha retardada de Wheeler via RMN, que consiste na troca do controle clássico do segundo divisor de feixe por um divisor de feixe controlado de forma coerente pelo estado de um q -bit auxiliar. Essa troca implica na possibilidade do segundo divisor de feixe estar em uma superposição de ausente e presente, ou seja, o divisor de feixe está presente e ausente, ao mesmo tempo.

Esse fato possui algumas implicações interessantes no entendimento da dualidade onda-partícula, relacionada ao princípio de complementaridade. Inicialmente, a introdução do dispositivo quântico implica na não necessidade uma separação por um intervalo tipo espaço entre a passagem do q -bit pelo primeiro divisor de feixe e a decisão da presença ou não do segundo, já que esse divisor de feixe agora encontra-se em uma superposição de presente e ausente. Uma outra implicação é a liberdade presente na ordem da realização das medidas sobre o sistema e o q -bit auxiliar, que não é presente na versão clássica. Na versão quântica do experimento, pode-se medir o q -bit auxiliar após a detecção do q -bit que passou pelo interferômetro, e só então se definir o comportamento do sistema, se de onda ou partícula. Isso leva a uma necessidade de se reformular o princípio de complementaridade, já que a complementaridade entre os comportamentos de onda e partícula não encontra-se mais nos aparatos experimentais, mas na correlação entre os dados experimentais. No entanto, apenas um dos comportamentos é observado por vez, ondulatório ou corpuscular.

Na nossa implementação por RMN, discutida na Seção 6.1, obtém-se uma boa concordância dos dados experimentais com a previsão teórica. E observa-se claramente a correlação entre o aparecimento de um padrão de interferência no comportamento do sistema quando o q -bit auxiliar é medido no estado $|1\rangle$, assim como a correlação entre o comportamento de partícula e o estado $|0\rangle$ do q -bit auxiliar. Também é observada a transição entre esses dois comportamentos do sistema na Fig. 6.3, com a passagem suave entre o comportamento ondulatório e o comportamento de partícula.

Na segunda parte do Capítulo, mostramos explicitamente que essa correlação introduzida

pela inserção do divisor de feixe quântico não é ligada ao emaranhamento, sendo presente mesmo em sistemas com alto grau de ruído branco como ocorre em RMN. Acreditamos que a fonte dessa correlação seja a possibilidade de se implementar portas quânticas não-fatoráveis, que é o caso da porta Hadamard-controlada e que desempenha o papel do divisor de feixe quântico nesse experimento. Também é mostrado explicitamente que a introdução desse dispositivo quântico permite a exclusão dos comportamentos de onda partícula como propriedades intrínsecas de um sistema quântico. Esse é mais um passo adiante na discussão, que perdura desde os tempos de Einstein e Bohr, sobre o caráter epistemológico da mecânica quântica, com a exclusão de modelos de variáveis ocultas que tenham uma noção realista dos comportamentos de onda e partícula, mesmo em sistemas altamente ruidosos.

Parte III

Outros estudos

Capítulo 7

Preparação de estados térmicos via RMN e simulação quântica de uma máquina térmica de um q -bit

Neste Capítulo são discutidos dois resultados preliminares. O primeiro é ligado à proposta de um método para a preparação de estados térmicos em um computador quântico, problema que não possui uma solução eficiente. Esse método proposto não utiliza q -bits auxiliares e faz uso das possibilidades experimentais de RMN, como a aplicação de gradientes de campo para a implementação de operações não unitárias sobre o sistema de spins nucleares. O segundo resultado é ligado à simulação em um computador quântico de uma máquina térmica de um único q -bit realizando um ciclo Otto. Essa simulação oferece a implementação de processos termodinâmicos não unitários, no caso a termalização de um q -bit em contato com um banho térmico, através do uso de um único q -bit auxiliar, que intermedia as trocas de calor nesses processos. Os dois resultados estão na fase de tomada de dados.

7.1 Preparação de estados térmicos via RMN

Uma das principais aplicações de um computador quântico é a simulação da evolução de sistemas quânticos, como apontado por Feynman [16]. Como a dimensão do espaço de Hilbert de um sistema de N partículas depende exponencialmente do número de partículas, a simulação desses sistemas em computadores clássicos se torna uma tarefa difícil. No entanto, é possível a simulação de um sistema quântico, de forma eficiente, a partir do controle de um conjunto de q -bits, como mostrado por Lloyd [151]. Esse fato foi comprovado experimentalmente, com papel destacado da RMN, com a simulação quântica de vários sistemas, como o oscilador harmônico [152], cadeias de spins [153] e transição de fase quântica [154]. Além disso,

simulações quânticas foram utilizadas para se ilustrar métodos de calcular a energia fundamental de moléculas [155] e de reações químicas [156], entre vários outros sistemas [157–159]. No entanto, para a simulação de vários sistemas de interesse na área de matéria condensada, é necessária a inicialização do sistema em um estado térmico, que em geral possui um alto grau de mistura. Existem algumas propostas de métodos para a preparação de estados térmicos, usando q -bits auxiliares, na literatura [160–162]. Um exemplo de simulação de um sistema quântico em um estado térmico é feita em [163], para o caso de um magneto frustrado.

Nessa Seção, discutimos um método de preparação de estados térmicos que não faz uso de q -bits adicionais para a preparação de um estado térmico, mas que utiliza a possibilidade de realização de transformações não-unitárias em sistemas de RMN por meio da aplicação de gradientes de campo. A ideia central do método é a possibilidade de se conectar quaisquer dois estados puros de um sistema de N q -bits por uma operação unitária, fato que é uma consequência direta da estrutura das representações lineares do grupo $SU(4)$ [164]. Utilizando esse fato, obtemos uma transformação unitária e sua decomposição em portas lógicas que podem ser implementadas em um sistema de N q -bits, que interagem sob um hamiltoniano qualquer. Após a eliminação das coerências indesejadas desse estado por meio da aplicação de gradientes de campo, temos uma mistura estatística com as populações dadas por uma distribuição Boltzmaniana [165]. O estado térmico é obtido pela aplicação de uma transformação unitária que mapeia a base de autoestados do hamiltoniano na base computacional.

A primeira parte consiste na obtenção de uma transformação unitária que leve o estado $|00\dots 0\rangle$ em um estado puro arbitrário $|\Psi\rangle$. Aqui daremos a demonstração para o caso específico de um sistema de dois q -bits, que pode ser facilmente estendida para um sistema contendo N q -bits. Nesse caso, precisamos obter uma transformação unitária que transforme o estado $|00\rangle$ no estado puro mais geral para esse tipo de sistema, dado por

$$|\Psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle, \quad (7.1)$$

em que $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1$. A obtenção da transformação unitária U , que leva o estado $|00\rangle$ em $|\Psi\rangle$ é feita a partir da decomposição dessa transformação em três outras, que atuam apenas em subespaços bidimensionais. Ou seja, decompomos $U = R_3R_2R_1$, em que cada operação é dada por

$$R_1 = \begin{pmatrix} a & -\sqrt{1-a^2} & 0 & 0 \\ \sqrt{1-a^2} & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & -\sqrt{1-a^2} \\ 0 & 0 & \sqrt{1-a^2} & a \end{pmatrix}, R_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{b}{\sqrt{1-a^2}} & -\frac{\sqrt{1-a^2-b^2}}{\sqrt{1-a^2}} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{1-a^2-b^2}}{\sqrt{1-a^2}} & \frac{b}{\sqrt{1-a^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$R_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c}{\sqrt{1-a^2-b^2}} & \frac{-d}{\sqrt{1-a^2-b^2}} \\ 0 & 0 & \frac{d}{\sqrt{1-a^2-b^2}} & \frac{c}{\sqrt{1-a^2-b^2}} \end{pmatrix}.$$

Como podemos observar da forma dessas matrizes, a transformação R_1 é uma rotação no segundo q -bit em torno do eixo y , com o ângulo de rotação determinado pelo parâmetro a e dado por $\theta_1 = 2 \arccos a$. A matriz R_3 é a representação matricial de uma rotação controlada no eixo y , com o controle no primeiro q -bit, e ângulo de rotação dado $\theta_3 = 2 \arccos \xi$, em que $\xi = c/\sqrt{1-a^2-b^2}$. A segunda transformação pode ser decomposta em um produto dos propagadores $\exp(i\phi I_x I_y)$ e $\exp(i\varphi I_y I_x)$. Esses dois propagadores são decompostos em um período de evolução livre sob o acoplamento J e rotações locais de $\pi/2$ ao longo dos eixos x e y em cada q -bit. Por exemplo, o propagador $\exp(i\alpha\phi I_x I_y)$ pode ser escrito na forma

$$e^{i\alpha I_x I_y} = R_{-y}^1 \left(\frac{\pi}{2} \right) R_x^2 \left(\frac{\pi}{2} \right) e^{i\alpha I_z I_z} R_y^1 \left(\frac{\pi}{2} \right) R_{-x}^2 \left(\frac{\pi}{2} \right), \quad (7.2)$$

em que o índice subscrito denota o eixo de rotação e o índice sobrescrito indica sobre qual q -bit é feita a rotação.

A aplicação de $U = R_3 R_2 R_1$ sobre o estado $|00\rangle$ nos fornece o estado puro $|\Psi\rangle$, dado na Eq. (7.1). Para que a matriz densidade desse estado tenha as mesmas populações que um estado térmico, fixamos os parâmetros a , b , c e d da seguinte forma:

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{e^{-\beta E_0}}{\mathcal{Z}}}, \\ b &= \sqrt{\frac{e^{-\beta E_1}}{\mathcal{Z}}}, \\ c &= \sqrt{\frac{e^{-\beta E_2}}{\mathcal{Z}}}, \\ d &= \sqrt{\frac{e^{-\beta E_3}}{\mathcal{Z}}}, \end{aligned} \quad (7.3)$$

em que os E_k são os autovalores do hamiltoniano de interação entre os q -bits do sistema, $\beta = 1/kT$ é o inverso energia térmica do sistema e \mathcal{Z} é a função de partição do sistema, dada por $\mathcal{Z} = \sum_k e^{-\beta E_k}$. Feita essa escolha de parâmetros, a matriz densidade do estado $|\Psi\rangle$ possui as populações de uma distribuição Boltzmanniana, com os níveis de energia do sistema dados por E_k . É importante notar que a obtenção dos autoestados e autovalores de energia para um sistema qualquer é um problema computacionalmente difícil. No entanto,

um algoritmo quântico para a diagonalização de um hamiltoniano qualquer foi proposto por Abrams e Lloyd [166], de forma que podemos tratar a diagonalização do hamiltoniano como um problema que pode ser resolvido à parte em um computador quântico.

Voltando ao contexto de RMN, podemos eliminar as coerências indesejadas do estado pseudo-puro $|\Psi\rangle$ com a aplicação de um gradiente de campo (no caso de sistemas heteronucleares), o que nos leva ao estado de mistura estatística que possui os mesmos autovalores do estado térmico do sistema a uma temperatura dada por $1/\beta$. O passo final para a preparação desse estado é a aplicação da transformação unitária U_2 , que mapeia a base de autoestados do hamiltoniano na base computacional, e é dada por [1]:

$$U_2 = \sum_k |\alpha_k\rangle\langle\beta_k|. \quad (7.4)$$

Nessa expressão, $|\alpha_k\rangle$ são os estados da base computacional e $|\beta_k\rangle$ os autoestados do hamiltoniano do sistema.

A generalização para o caso de um sistema de N q -bits é imediata e segue a mesma ideia do caso de dois q -bits. Sempre é possível se obter uma transformação unitária $U = R_{d-1}R_{d-2}\dots R_1$, em que $d = 2^N$ é a dimensão do espaço de Hilbert do sistema. Assim como no caso para dois q -bits, cada uma das R_k atua somente em um subespaço bidimensional do espaço de Hilbert. Aqui fica clara uma deficiência do método, já que o número de operações necessárias para se implementar a transformação U cresce exponencialmente com o número de partículas do sistema.

7.1.1 Sistemas homonucleares

Como discutido na Subseção 2.4.1, os gradientes de campo não afetam as coerências de ordem zero, por exemplo, ligadas à elementos da matriz densidade da forma $I_+^1 I_-^2 I_z^3$ e $I_-^1 I_z^2 I_+^3$ em sistemas de três spins (entre outros). Como o estado pseudo-puro $|\Psi\rangle$, dado em (7.1) apresenta coerências desse tipo, a aplicação de apenas um gradiente de campo não fornece o estado de mistura estatística desejado, com apenas as populações dadas por uma distribuição Boltzmanniana. Uma opção para a suprimir essas coerências seria a técnica de *phase cycling*¹. No entanto, essa técnica não suprime coerências de ordem zero, já que essas coerências são invariantes quanto à rotações ao longo do eixo z . Isso se deve ao fato de que uma coerência de ordem m , sob a ação de uma rotação em z de um ângulo φ , adquire uma fase dada por $-m\varphi$. Como $m = 0$, as coerências de ordem zero não adquirem nenhuma fase.

¹Essa técnica consiste na seleção de coerências por meio da aplicação de rotações ao longo do eixo z , em diferentes experimentos. Os ângulos de rotação são escolhidos de forma que a média temporal desses experimentos apresente o sinal relativo apenas às coerências de ordens desejadas.

Apesar dessas dificuldades, algumas técnicas para se suprimir essas coerências em um único experimento foram desenvolvidas recentemente [167, 168], que consistem na aplicação de pulsos de 180° combinadas com a aplicação de gradientes de campo [167] ou no uso de filtros na direção z em cascata [168]. Uma grande vantagem do método que usa a aplicação de filtros é a robustez do sinal obtido à relaxação transversal, ligada à perda de coerência do sistema (veja a Subseção 2.1.4, do Capítulo 2).

Uma outra alternativa ainda seria evitar a criação desse tipo de coerência, alterando a sequência de transformações unitárias. Por exemplo, no caso de um sistema homonuclear de dois q -bits, a transformação R_2 da Eq. (7.2) seria trocada por uma rotação controlada com controle no segundo q -bit seguida de uma $CNOT$, com controle no primeiro. Essa sequência, seguida da aplicação de um gradiente, garante que coerências de ordem zero não sejam criadas. A partir desse ponto, aplica-se a rotação controlada R_3 e novamente um gradiente para a obtenção da distribuição Boltzmanniana das populações da matriz densidade. O custo experimental, comparado com o caso de um sistema heteronuclear, é a necessidade de se executar um número maior de rotações locais, já que R_2 também é um produto de duas transformações unitárias que atuam em dois q -bits.

7.1.2 Alguns resultados preliminares

Para ilustrarmos a aplicabilidade do método, utilizamos um sistema de dois q -bits, com o hamiltoniano de Heisenberg, que é utilizado em estudos ligados a transições de fases e sistemas de matéria condensada [169]. O hamiltoniano utilizado é dado por

$$H = -(I_x^1 I_x^2 + I_y^1 I_y^2 + I_z^1 I_z^2). \quad (7.5)$$

Para definirmos as transformações U e U_2 , precisamos dos autovalores e dos níveis de energia do sistema. Nesse caso, os autoestados são dados por $|00\rangle$, $|\Psi^+\rangle$, $|11\rangle$ e $|\Psi^-\rangle$. Nesse sistema, os três primeiros estados são degenerados com autovalor -1 e o último possui autovalor 3 . Assim, a transformação U_2 é dada por

$$U_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.6)$$

A informação ligada aos autovalores é utilizada na definição das transformações R_1 , R_2 e

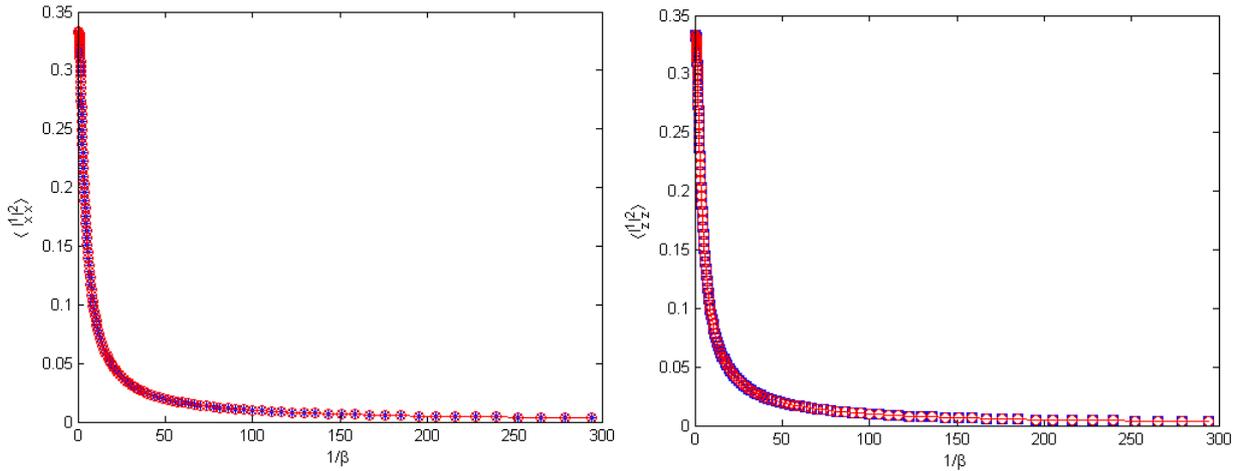


Figura 7.1: Valores esperados de $\langle I_x^1 I_x^2 \rangle$ e $\langle I_z^1 I_z^2 \rangle$ em função de $1/\beta$. Em azul os pontos ligados à previsão teórica, em vermelho os pontos da simulação numérica.

R_3 , em conjunto com a temperatura escolhida para o estado térmico a ser preparado. As Eqs. (7.2) e (7.3) definem essas transformações. Na Figura 7.1 são mostradas as curvas para os valores esperados $\langle I_x^1 I_x^2 \rangle$ e $\langle I_z^1 I_z^2 \rangle$. em função de $1/\beta$. Uma outra figura de método para se verificar a precisão do método é a comparação entre os estados esperados teoricamente e os estados obtidos por meio da aplicação do método, por meio da fidelidade, para cada valor de β . Essa comparação pode ser encontrada observada na Fig. 7.2.

7.1.3 Conclusões preliminares

Nessa Seção foi proposto um método para a preparação de estados térmicos no contexto de experimentos de RMN, que não utiliza q -bits adicionais para a preparação desses estados como em [160–162]. A ideia principal do método é baseada na existência de uma transformação unitária que leva o estado $|00\dots 0\rangle$ a um estado puro arbitrário $|\Psi\rangle$, propriedade garantida pela estrutura do grupo $SU(N)$ [164].

Uma possível desvantagem do método relaciona-se ao crescimento exponencial do número de operações para a implementação da transformação U , responsável por preparar o estado pseudo-puro $|\Psi\rangle$ a partir do estado $|00\dots 0\rangle$. No entanto, na literatura não existem métodos para a preparação de um estado térmico de forma eficiente em um computador quântico, apenas métodos que possuem um limite superior no número de operações necessárias para a preparação de tais estados e que podem ser eficientes em casos particulares [160–162]. Uma segunda possível deficiência desse método é a necessidade da preparação do estado pseudo-puro inicial $|00\dots 0\rangle$, o que já possui um custo experimental que aumenta exponencialmente com o tamanho do sistema. Dessa forma, efeitos de descoerência podem ser relevantes em casos de vários q -bits sendo manipulados.

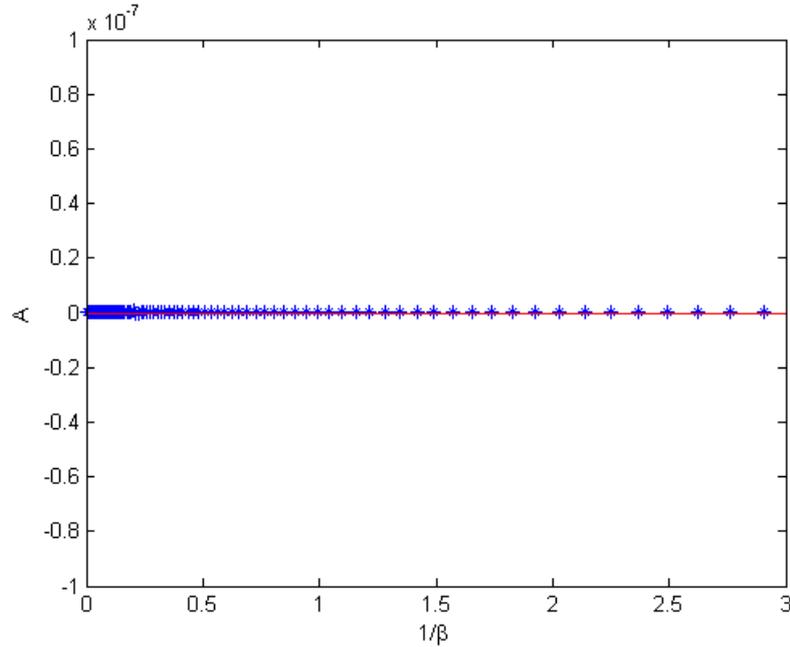


Figura 7.2: Comparação entre os estados obtidos com o método e o modelo teórico. No eixo vertical, $A = 1 - \mathcal{F}$, em que $\mathcal{F} = \sqrt{\sqrt{\rho'(\beta)}\rho(\beta)\sqrt{\rho'(\beta)}}$ é a fidelidade dos estados $\rho'(\beta)$, obtidos a partir do método, com os estados $\rho(\beta)$, esperados teoricamente. No eixo horizontal, o inverso de β .

Apesar da não-eficiência do método aqui proposto, esse método pode indicar um caminho alternativo para as propostas de preparação de estados térmicos, focados no controle dos q -bits utilizando transformações não-unitárias, como a aplicação de gradientes de campo, em conjunto com as operações unitárias. Além disso, esse método pode ser utilizado para simulações de sistemas térmicos de baixas dimensões, como sistemas magnéticos frustrados [163] ou para estudos ligados a correlações quânticas em transições de fase a temperatura finita, como proposto em [170]. Uma outra possibilidade desse método é a preparação não apenas de estado térmicos, mas de outros estados de mistura estatística interessantes no contexto de computação e informação quânticas, como os estados com emaranhamento preso [85]. Esses estados podem ser preparados utilizando esse método utilizando um único experimento, ao contrário da combinação de médias temporal e espacial utilizada por Kamppermann e seus colaboradores [171].

7.2 Simulação quântica de uma máquina térmica de um q -bit

O ciclo Otto é considerado o ciclo mais fundamental na termodinâmica quântica [172]: consiste de dois processos adiabáticos, apenas com a mudança dos níveis de energia do sistema e a

distribuição dos níveis de energia inalterada, e dois processos isocóricos, em que as populações dos níveis de energia mudam e os níveis de energia permanecem constantes. A máquina térmica que consideramos nessa Seção é um sistema quântico de dois níveis, uma versão quântica da máquina de Otto [173].

Os únicos princípios necessários são a equação de Schrödinger, a interpretação probabilística das funções de onda e o postulado de medida de von Neumann [174]. No entanto, sem um melhor entendimento de como o comportamento clássico emerge da mecânica quântica, é necessário assumir que as distribuições de Gibbs de equilíbrio térmico para os banhos que são acoplados ao sistema quântico. Essa hipótese é adicional àquelas da mecânica quântica.

O valor esperado da energia de um sistema quântico é $U = \langle E \rangle = \sum_k p_k E_k$, em que E_k são os níveis de energia e p_k são as probabilidades de ocupação correspondentes. Na forma infinitesimal

$$dU = \sum_k E_k dp_k + \sum_k p_k dE_k, \quad (7.7)$$

das quais podemos identificar as definições de calor e trabalho, dadas por $dQ = \sum_k E_k dp_k$ e $dW = \sum_k p_k dE_k$, respectivamente. Em outras palavras, a Eq. (7.7) é uma expressão para a primeira lei da termodinâmica, $dU = dQ + dW$. Essas duas identificações estão de acordo com o fato de que trabalho só pode ser feito por ou sobre um sistema com uma mudança das coordenadas generalizadas do sistema, que levam à mudanças na distribuição dos níveis de energia [175].

Um ciclo da máquina térmica possui quatro estágios:

1. O sistema possui uma probabilidade $p_0^1(0)$ de estar no estado fundamental, antes de interagir com um banho térmico a temperatura T_1 . Após um tempo de contato t_1 , o sistema tem uma probabilidade $1 - p_0^1(t_1)$ de ganhar alguma energia do banho e passar para o estado excitado. Apenas calor é transferido nesse processo, devido à mudança nas probabilidades de ocupação.
2. O sistema é isolado do banho térmico e passa por uma expansão adiabática, que reduz a diferença entre os níveis de energia de Δ_1 para Δ_2 . As probabilidades de ocupação dos níveis de energia são inalteradas nesse processo, se o processo ocorrer em acordo com o teorema adiabático quântico [176]. Uma quantidade de trabalho é feita pelo sistema, mas nenhum calor é transferido.
3. O sistema, com uma probabilidade $1 - p_0^2(0)$ de estar no estado excitado, passa a interagir com outro banho térmico, de temperatura T_2 . O contato ocorre por um tempo t_2 , até ter

uma probabilidade $p_0^2(t_2)$ de ceder energia para o banho e decair para o nível mais baixo de energia.

4. O sistema é retirado do contato com o banho e passa por uma contração adiabática, que faz a diferença de energia entre os dois níveis volte para o valor original Δ_1 . Nesse processo, uma quantidade de trabalho é feita sobre o sistema.

É importante notar que não é necessário definir uma temperatura para o sistema quântico. Todas as temperaturas são definidas para os banhos térmicos, assumidos como estados térmicos. A absorção e liberação de energia nos processos (1) e (3) não ocorrem de maneira determinística. Esses processos ocorrem de forma probabilística, como previsto pela mecânica quântica. As probabilidades para que tais transições ocorram dependem das interações com o banhos, assim como de algumas das propriedades desses. A ciclicidade da máquina impõe algumas condições sobre as probabilidades $p_0^1(0) = p_0^2(t_2)$ e $p_0^1(t_1) = p_0^2(0)$. O trabalho realizado pela máquina nos dois processos adiabáticos é dado então por, se $\Delta_1 > \Delta_2$,

$$\Delta W = (p_0^2(t_2) - p_0^1(t_1))(\Delta_2 - \Delta_1). \quad (7.8)$$

Se o sistema termaliza com os banhos nos estágios (1) e (3), as probabilidades de ocupação são dadas por

$$\tilde{p}_0^k(t_k) = \frac{1}{1 + \exp(-\Delta_k/2k_B T_k)} \quad (7.9)$$

e devem ser usadas em (7.8). Essas probabilidades são necessariamente não nulas. Logo, mesmo no caso em que $T_2 < T_1$ existem, com uma pequena probabilidade $(1 - \tilde{p}_0^1)\tilde{p}_0^2$, ciclos em que as transições descritas nos estágios (1) e (3) acima ocorrem. Isso resulta na existência de certos ciclos que resultam na absorção de calor de um reservatório e na conversão desse calor em trabalho, dado por $(\Delta_2 - \Delta_1)$. Isso equivale a uma violação do enunciado de Kelvin-Planck da segunda lei da termodinâmica, devido à natureza probabilística dos processos quânticos. No entanto, essa violação é aleatória e com uma baixa probabilidade, de forma que não pode ser explorada para fins práticos.

Apesar dessa violação quântica aleatória, a segunda lei da termodinâmica vale na média. O trabalho pode ser extraído dessa máquina, em equilíbrio térmico, se e só se, $p_0^2(t_2) > p_0^1(t_1)$. O que implica, se usada a Eq. (7.9), em

$$T_1 > T_2 \left(\frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right). \quad (7.10)$$

As expressões (7.8) e (7.10) não apenas confirmam a validade da segunda lei da termodinâmica,

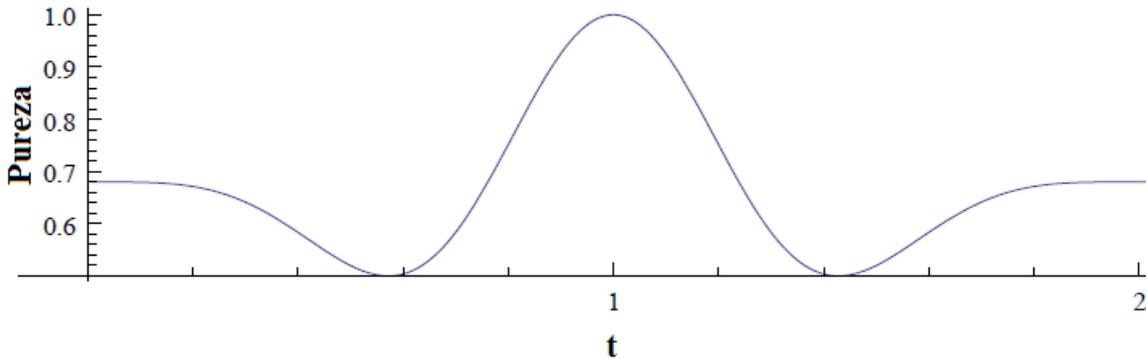


Figura 7.3: Evolução da pureza durante o tempo de interação entre \mathcal{S} e \mathcal{E} sob o hamiltoniano dado em (7.12).

mas também a refina especificando o quanto T_1 deve ser maior que T_2 para que algum trabalho possa ser extraído. Em outras palavras, nenhum trabalho é extraído mesmo quando T_1 é maior que T_2 , mas menor que $T_2(\Delta_1/\Delta_2)$. Isso está em contradição com a condição necessária clássica de que T_1 precisa apenas ser maior² que T_2 .

A eficiência da máquina é dada por³

$$\eta = \frac{\Delta W}{Q_{em}} = 1 - \frac{\Delta_2}{\Delta_1}, \quad (7.11)$$

que é independente das temperaturas dos banhos e é a eficiência máxima permitida pelas leis da mecânica quântica [173]. Essa relação é um limite superior, com Δ_1 e Δ_2 apropriados, para a eficiência de qualquer máquina térmica, incluindo a máquina de Carnot, já que o trabalho extraído pelos dois processos adiabáticos é o máximo que pode ser extraído [165].

7.2.1 Proposta de simulação quântica via RMN.

Para testarmos experimentalmente a proposta de Kieu [173], utilizamos um fato bem conhecido: a evolução não-unitária de um sistema quântico \mathcal{S} sempre pode ser vista como a evolução de apenas uma parte de sistema maior, $\mathcal{S} \otimes \mathcal{E}$, que evolui de forma unitária [172]. \mathcal{E} é o ambiente ao qual \mathcal{S} está acoplado. A evolução não-unitária de \mathcal{S} ocorre devido à presença de correlações quânticas entre o sistema e o ambiente.

Utilizamos a evolução unitária de um sistema de dois q -bits, um com o papel do sistema que sofre os processos termodinâmicos, e o outro como ambiente. As duas termalizações são associadas a diferentes tempos de interação do sistema com o ambiente. No caso de apenas

²Para máquinas de Carnot a razão entre as sucessivas diferenças dos níveis de energia tende a um, veja [177].

³Essa expressão é obtida em um caso mais específico por Scovil e seus colaboradores em [178].

um q -bit, a pureza do estado do sistema é suficiente para se controlar os dois processos de termalização. Esse controle da pureza é obtido ajustando-se o tempo de evolução de $\mathcal{S} \otimes \mathcal{E}$ sob um hamiltoniano XY anisotrópico, dado por

$$H_{xy} = J_x I_{\mathcal{S}}^x I_{\mathcal{E}}^x + J_y I_{\mathcal{S}}^y I_{\mathcal{E}}^y, \quad (7.12)$$

em que J_k são as constantes de acoplamento e I_j^k são os operadores de spin $1/2$ sobre j , na direção k ($j, k = 1, 2$). Para os valores $J_x = 1$ e $J_y = 0,5$ dos acoplamentos, pode-se obter qualquer pureza para o estado reduzido de \mathcal{S} (veja a Fig. 7.3). Esse processo não é uma termalização no sentido de levar o estado do sistema para um estado assintótico. No entanto, esse processo descreve a mesma transferência de calor que o processo de termalização, com o mesmo estado de saída do sistema.

O sistema \mathcal{S} é dado por um spin $1/2$ que interage com um campo externo B_0 , por uma interação do tipo Zeeman. Nesse caso, cada uma das partes do ciclo pode ser realizada da seguinte forma:

1. No primeiro estágio, o sistema possui uma diferença de energia entre os dois estados possíveis dada por Δ_1 . O sistema $\mathcal{S} \otimes \mathcal{E}$ interage por um tempo t_1 sob o hamiltoniano dado em (7.12), para que o estado ao final desse processo seja um estado térmico à temperatura do banho, T_1 . Nesse processo, o sistema absorve energia na forma de calor do ambiente. Nesse caso, como utilizamos apenas um q -bit como o reservatório, a energia cedida para o sistema pode ser observada por uma diminuição da pureza do estado do ambiente.
2. Após a termalização do sistema a uma temperatura T_1 , o sistema é sujeito a uma expansão adiabática. Esse processo reduz a diferença de energia entre os dois níveis do sistema, de Δ_1 para Δ_2 . Essa redução pode ser feita pela aplicação de uma rotação na direção z , de qualquer ângulo, sobre o sistema. A diferença de energia é controlada pela frequência do pulso de radiofrequência aplicado. Em vez do pulso ser na frequência de ressonância do sistema, é aplicado fora da ressonância por um fator $\delta\omega$. No referencial girante (veja a Subseção 2.1.3), essa diferença para a frequência de ressonância implica em aumento ou diminuição da diferença entre os níveis de energia, dependendo do sinal de $\delta\omega$. Isso é observado diretamente no espectro, que tem a posição do multipletto alterada por $\delta\omega$. Essa técnica já foi utilizada algumas vezes no contexto do processamento de informação quântica por RMN [154, 179].
3. Após o segundo estágio, o sistema \mathcal{S} entra em contato com um banho térmico a temperatura T_2 e com a diferença de energia dada por Δ_2 . Para que o estado seja dado por um estado de Gibbs em equilíbrio com o banho, deixa-se o sistema $\mathcal{S} \otimes \mathcal{E}$ evoluir

por um período t_2 sob a interação dada na eq. (7.12). Nessa parte a pureza do q -bit que representa o ambiente é aumentada, o que se relaciona com a cessão de calor para o banho.

4. Finalmente, o q -bit sofre uma contração adiabática, que volta a diferença de níveis para a inicial, dada por Δ_1 . Esse processo adiabático também é realizado por uma rotação em z , de qualquer ângulo, sobre o sistema, agora com a radiofrequência aplicada novamente na ressonância do sistema com o campo externo. Nessa parte do ciclo, o estado do sistema deve voltar ao estado inicial.

Os dois processos adiabáticos podem ser realizados com apenas uma rotação devido à condição adiabática para esse caso ser trivial e ao traço parcial comutar com essa rotação, independente do estado do ambiente. Como o hamiltoniano do sistema comuta com as rotações em z , a condição adiabática é satisfeita para qualquer valor de $\delta\omega$ e qualquer ângulo de rotação.

Um outro detalhe experimentalmente relevante é que a diferença para a frequência de ressonância dos pulsos aplicados é pequena se comparada à frequência de ressonância do sistema, que é da ordem de 125MHz para o ^{13}C . No referencial girante, a diferença entre os níveis de energia é dada apenas pelo deslocamento químico, que na amostra de clorofórmio a ser utilizada é da ordem de 2kHz . Os pulsos aplicados serão removidos da ressonância apenas por uma ordem de grandeza relacionada ao deslocamento químico nesse caso. Assim, o erro introduzido por essas operações pode ser descartado (veja a Subseção 2.1.3).

Para se implementar as interações entre o sistema e o ambiente em um sistema de RMN de dois q -bits, podemos utilizar o acoplamento J entre os dois spins $1/2$. Como os dois termos do hamiltoniano da Eq. (7.12) comutam, o operador de evolução pode ser escrito como

$$U = e^{(-i\frac{H_{xy}t}{\hbar})} = e^{(-iJ_x I_S^x I_E^x t)} e^{(-iJ_y I_S^y I_E^y t)}. \quad (7.13)$$

Para se implementar cada uma dessas operações, aplicamos pulsos $(\pi/2)_{-y}$ (ou $(\pi/2)_x$, respectivamente) nos dois núcleos, seguidos de um período de evolução livre dado por

$$\tau = \frac{J_{x(y)}}{J} t, \quad (7.14)$$

em que J_x (ou J_y) é o termo ligado ao hamiltoniano de (7.12), J é a intensidade do acoplamento entre os spins e t é a duração do período de evolução sob o hamiltoniano H_{xy} . É importante notar que t é apenas um parâmetro ligado ao tempo de evolução τ dos spins sob o acoplamento J . Depois desse intervalo de evolução livre, são aplicados pulsos $(\pi/2)_y$ (ou $(\pi/2)_{-x}$) sobre os dois spins.

A relação entre os parâmetros do ciclo, Δ_1 , Δ_2 , T_1 e T_2 com o parâmetro t da Eq. (7.14) pode ser obtida numericamente, a partir do controle da pureza do estado. A relação entre os parâmetros com os estados antes de cada termalização pode ser obtida a partir das expressões para as probabilidades de ocupação do estado fundamental. Para o estado do sistema antes da primeira termalização, que é uma matriz diagonal com população a no estado fundamental e que possui os parâmetros Δ_2 e T_2 devido à ciclicidade, temos

$$a = \frac{e^{(-\frac{\Delta_2}{2k_B T_2})}}{e^{(-\frac{\Delta_2}{2k_B T_2})} + e^{(+\frac{\Delta_2}{k_B T_2})}}, \quad (7.15)$$

o que implica na relação

$$\frac{\Delta_2}{2k_B T_2} = \ln \left(\frac{1-a}{a} \right). \quad (7.16)$$

De forma análoga, pode se obter uma relação entre a população do estado fundamental após a expansão adiabática e os parâmetros Δ_1 e T_1 . Como nesse estágio a matriz densidade é diagonal, com população b no estado fundamental, e dependente desses parâmetros, temos

$$b = \frac{e^{(-\frac{\Delta_1}{2k_B T_1})}}{e^{(-\frac{\Delta_1}{2k_B T_1})} + e^{(+\frac{\Delta_1}{2k_B T_1})}}. \quad (7.17)$$

Dessa relação, obtemos

$$\frac{\Delta_1}{2k_B T_1} = \ln \left(\frac{1-b}{b} \right). \quad (7.18)$$

Dividindo a Eq. (7.16) pela expressão de (7.18), obtém-se a relação entre os parâmetros dos estados e as populações dos estados antes de cada termalização, dada por

$$\frac{\Delta_2 T_1}{\Delta_1 T_2} = \frac{\ln \left(\frac{1-a}{a} \right)}{\ln \left(\frac{1-b}{b} \right)}. \quad (7.19)$$

As purezas dos estados antes dos estágios (1) e (3) do ciclo são dadas por $P_1 = 2a^2 - 2a + 1$ e $P_2 = 2b^2 - 2b + 1$, respectivamente. Assim, as purezas são diretamente relacionadas com os parâmetros dos processos de termalização (Δ_k e T_k , $k = 1, 2$). Como mostrado na Fig. 7.3, pode se controlar a pureza dos estados pelo tempo de interação entre o sistema e o ambiente. Isso implica que podemos obter numericamente um t tal que o estado do sistema possua a população do estado fundamental dada por (7.16) ou (7.18), que são as populações dos estados térmicos para os banhos as temperaturas T_1 e T_2 , respectivamente. Uma condição que deve ser aplicada na obtenção numérica do parâmetro t é a imposição de ciclicidade para a sequência

dos processos termodinâmicos executados sobre o sistema. Isso implica que o ciclo todo seja descrito por uma transformação unitária do tipo $e^{i\theta}\mathbb{1}$, que garante que os estados inicial e final sejam idênticos.

7.2.2 Conclusões preliminares

Essa proposta para simulação de uma máquina térmica de um q -bit, executando um ciclo Otto, está sendo testada numericamente no momento e esperamos começar a fase de tomada de dados em breve. O objetivo principal é fazermos um estudo experimental da condição para a extração de trabalho na máquina térmica proposta por [173]. Essa condição é dada pela Eq. (7.10), e emerge da natureza quântica da máquina em contradição com a condição clássica, de que a única condição para se extrair trabalho em um ciclo termodinâmico é dada por $T_1 > T_2$. Para uma máquina de um único q -bit, essa condição não é suficiente e é generalizada para a condição dada em (7.10).

Capítulo 8

Conclusão e perspectivas futuras

O primeiro resultado dessa tese é ligado a um estudo utilizando testemunhas de emaranhamento, para a detecção dessa correlação genuinamente quântica, em estados pseudo-puros. Utilizamos duas testemunhas de emaranhamento nesse estudo: uma definida a partir do protocolo de codificação superdensa [119] e um conjunto de testemunhas definidas para cada estado da base de Bell e que são testemunhas ótimas para a detecção de emaranhamento nos estados Bell-diagonal. A detecção de pseudo-emaranhamento (o emaranhamento da parte pura dos estados pseudo-puros) por essas testemunhas é comparada em duas situações: uma para a detecção de pseudo-emaranhamento em estados Bell-diagonal, mostrando experimentalmente que existem estados pseudo-emaranhados não-detectados pela testemunha definida por Rahimi e seus colaboradores mas que são detectados pelas testemunhas apresentadas nesse resultado, definidas a partir de um critério baseado em *PSD*'s.

Uma possível extensão desse resultado seria o desenvolvimento de métodos para a detecção de pseudo-emaranhamento, de forma eficiente, em sistemas com um número maior de q -bits. Nessa situação de sistemas maiores, existem os estados de emaranhamento preso, que não podem ser detectados por testemunhas de emaranhamento decomponíveis ou pelo critério de Peres-Horodecki [85, 86].

O segundo e o terceiro resultados são ligados à recente proposta por Ioniciu e Terno de uma versão quântica para o experimento de escolha retardada de Wheeler [24]. Essa proposta consiste na introdução de um dispositivo quântico para o controle do segundo divisor de feixe de um interferômetro de Mach-Zehnder. O segundo resultado trata da implementação experimental dessa proposta em um sistema de RMN de dois níveis [27], que confirma as previsões teóricas e é anterior às implementações via ótica quântica [29–31]. Uma das implicações diretas desse resultado é a necessidade de se reformular o princípio de complementaridade, já que um único aparato experimental é utilizado para se observar tanto o comportamento de onda como o comportamento de partícula de um sistema quântico. Isso contradiz a formulação inicial

do princípio, que afirma que existe uma impossibilidade, relacionada ao princípio de incerteza, de um único aparato experimental ser utilizado para a observação desses dois comportamentos complementares.

O outro resultado ligado a essa proposta é a análise dessa proposta, para sistemas na presença de ruído branco, como é o caso da RMN. Nesse resultado mostramos que a correlação entre o estado do q -bit auxiliar e o comportamento do q -bit que passa pelo interferômetro permanece mesmo na presença de um nível arbitrário de ruído branco. Mostramos ainda que modelos de variáveis ocultas locais, que possuam noções realistas dos comportamentos como onda ou partícula de um sistema quântico, são incompatíveis com esse experimento. Esses dois resultados são válidos para qualquer $\varepsilon > 0$, o que implica que o emaranhamento do sistema com o q -bit auxiliar, presente no caso puro, não é o recurso responsável por esse fenômeno.

Uma possível extensão desses dois resultados seria a análise para o caso em que o sistema está em um estado de mistura estatística máxima, e o q -bit auxiliar preparado em uma superposição. A motivação para uma análise experimental desse caso é a possibilidade de observação de um padrão de interferência em sistemas óticos mesmo quando o estado de entrada no interferômetro é dado pela identidade. Esse fato pode ser observado se o atraso (devido à diferença de fase) entre os braços for menor que o tempo de coerência. Isto ocorre porque dentro do tempo de coerência, a polarização do laser é bem definida, flutuando apenas na escala do tempo de coerência. O objetivo seria a observação de uma correlação entre as medidas sobre o q -bit auxiliar e o surgimento ou não de um padrão de interferência no sistema. Uma outra possível extensão, também no contexto de ótica quântica, seria a observação de que as medidas sobre o q -bit auxiliar podem ser realizadas após a detecção do sistema mesmo na ausência de emaranhamento.

O último Capítulo da teste trata de dois resultados preliminares, que serão concluídos o mais brevemente possível. O primeiro resultado é uma proposta de preparação de estados térmicos voltada para técnicas de RMN, trocando a utilização de q -bits auxiliares pela utilização de operações não-unitárias. Como o método proposto é geral, isso possibilitaria a simulação de sistemas de matéria condensada com o sistema a temperatura finita, como no caso de magnetos frustrados [163]. O segundo resultado, ainda na fase de simulações numéricas, é a simulação em um sistema quântico de uma máquina térmica de apenas um q -bit e que executa um ciclo Otto. Essa simulação é feita a partir da extensão do sistema para um maior, acoplado com os banhos térmicos. Essa extensão do sistema permite que o ciclo seja executado como uma evolução unitária do sistema estendido. A implementação com sucesso dessa simulação de um sistema aberto abriria caminho para o estudo de outros processos termodinâmicos ou da simulação de outros sistemas abertos.

Referências Bibliográficas

- [1] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (Addison Wesley, 1993).
- [2] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen. *Phys. Rev.* **47** 777 (1935).
- [3] J. S. Bell, *Physics* **1**, 195 (1964).
- [4] J. Clauser, M. Horne, A. Shimony, R. Holt. *Physical Review Letters* **23**, 880 (1969).
- [5] S. J. Freedman and J. F. Clauser. *Physical Review Letters* **28**, 938 (1972).
- [6] A. Aspect *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982).
- [7] G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter and A. Zeilinger, *Physical Review Letters* **81**, 5039 (1998).
- [8] A. M. Souza, A. Magalhães, J. Teles, E. R. deAzevedo, T. J. Bonagamba, I. S. Oliveira e R. S. Sarthour *New J. Phys.* **10**, 033020 (2008).
- [9] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel e H. Zbinden. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145 (2002).
- [10] C. H. Bennett , G. Brassard , C. Crépeau , R. Jozsa , A. Peres e W. K. Wootters, *Physical Review Letters* **70**, 1895 (1993)
- [11] R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, *The Feynman Lectures of Physics*, (Addison Wesley Longman, 1964).
- [12] N. Bohr, *Causality and Complementarity: Supplementary papers edited by Jan Faye and Henry J. Folse. The Philosophical Writings of Niels Bohr, Volume IV.* (Ox Bow Press, 1998).
- [13] J. A. Wheeler, in *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, A. R. Marlow, ed. (Academic, New York,1978).
- [14] V. Jacques, E. Wu, F. Grosshans, F. Treussart, P. Grangier, A. Aspect, and J. F. Roch, *Science* **315**, 966 (2007).

- [15] P. Benioff. *Journal of Statistical Physics* **29**, 515 (1982).
- [16] R. P. Feynman. *International Journal of Theoretical Physics* **21**, 467 (1982).
- [17] D. Deutsch. *Proceedings of the Royal Society of London A* **400**, 97 (1985).
- [18] P. W. Shor, *SIAM J. Comput.* **26** 1484(1997).
- [19] B. Terhal. *Physics Letters A* **271**, 319 (2000).
- [20] M. Lewenstein, B. Kraus, J. I. Cirac e P. Horodecki, *Physical Review A* **62**, 052310 (2000).
- [21] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano e D. J. Wineland, *Physical Review Letters* **75**, 4714 (1995)
- [22] J. A. Jones e M. Mosca, *J. Chem. Phys.* **109**, 1648 (1998).
- [23] M. Ozawa, *Physical Review A* **67**, 042105 (2003).
- [24] R. Ionicioiu and D. R. Terno, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 230406 (2011).
- [25] k, G. Badurek, M. Ozawa and Y. Hasegawa, *Nature Physics* **8**, 185 (2012).
- [26] L. A. Rozema, A. Darabi, D. H. Mahler, A. Hayat, Y. Soudagar, A. M. Steinberg, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 100404(2012).
- [27] R. Auccaise, R. M. Serra, J. G. Filgueiras, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira and L. C. Céleri, *Phys. Rev. A* **85**, 032121 (2012).
- [28] S. S. Roy, A. Shukla and T. S. Mahesh, *Phys. Rev. A* **85**, 022109 (2012).
- [29] J.-S. Tang, Y.-L. Li, C.-F. Li and G.-C. Guo, *Nature Photonics* **6**, 600 (2012).
- [30] A. Peruzzo, P. Shadbolt, N. Brunner, S. Popescu and J. L. O'Brien, *Science* **338**, 634 (2012).
- [31] F. Kaiser, T. Coudreau, P. Milman, D. B. Ostrowsky and S. Tanzilli, *Science* **338**, 637 (2012).
- [32] J. G. Filgueiras, T. O. Maciel, R. E. Auccaise, R. O. Vianna, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira, *Quantum Information Processing* DOI:10.1007/s11128-011-0341-z (2011) (disponível online).
- [33] J. G. Filgueiras, R. S. Sarthour, A. M. S. Souza, I. S. Oliveira, R. M. Serra, L. C. Céleri, <http://www.arxiv.org/abs/1208.0802v2> (2012).
- [34] L. M. K. Vandersypen e I. L. Chuang, *Reviews of Modern Physics* **76**, 1037 (2004).

- [35] J. A. Jones, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* **59**, 91 (2011).
- [36] I. S. Oliveira, T. J. Bonagamba, R. S. Sarthour, J. C. C. Freitas e E. R. deAzevedo, *NMR Quantum Information Processing*, (Elsevier, Amsterdam, 2007).
- [37] Stolze J. and Suter D., *Quantum Computing: A Short Course from Theory to Experiment*, (Wiley-VCH, Berlin, 2008).
- [38] C. Slichter, *The Principles of Magnetic Resonance*, (Springer-Verlag, Berlin, 1990).
- [39] R. R. Ernst, G. Bodenhausen e A. Wokaun, *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*, (Clarendon Press, Oxford, 1990).
- [40] A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism* (Clarendon Press, Oxford, 1983).
- [41] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Computação Quântica e Informação Quântica*, (Bookman, 2003).
- [42] R. Auccaise, J. Teles, R. S. Sarthour, T. J. Bonagamba, I. S. Oliveira, E. R. de Azevedo. *Journal of Magnetic Resonance* **192**, 17-26, (2008).
- [43] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood e I. L. Chuang, *Nature* **414**, 883 (2001).
- [44] L.K. Grover, *American Journal of Physics* **69**, 769 (2001).
- [45] C. Bauer, R. Freeman, T. Frenkiel, J. Keeler, A. J. Shaka, *J. Magn. Reson.* **58**, 442 (1984).
- [46] W. Warren, *J. Chem. Phys.* **81**, 5437 (1984).
- [47] H. Geen, R. Freeman, *J. Magn. Reson.* **93**, 93 (1993).
- [48] N. Linden, E. Kupce, R. Freeman, *Chem. Phys. Lett.* **311**, 321 (1999).
- [49] L. Emsley, G. Bodenhausen, *Chem. Phys. Lett.* **168**, 297 (1990).
- [50] E. Knill, R. Laflamme, R. Martinez e C. H. Tseng, *Nature* **404**, 368 (2000).
- [51] X. Peng, D. Suter e D. A. Lidar, *J. Phys. B* **44**, 154003 (2011).
- [52] A. M. Souza, G. A. Álvarez, D. Suter. arXiv:1110.6334v1 [quant-ph] (2011).
- [53] A. M. Souza, G. A. Álvarez, D. Suter. arXiv:1206.2933v1 [quant-ph] (2012).
- [54] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T.S. Herbrüggen, S.J. Glaser, *J. Magn. Reson.* **172**, 296 (2005).

- [55] E. M. Fortunato, M. A. Pravia, N. Boulant, G. Teklemariam, T. F. Havel e D. G. Cory, J. Chem. Phys. **116**, 7599 (2002).
- [56] J. Fitzsimons, L. Xiao, S. C. Benjamin e J. A. Jones, Phys. Rev. Lett. **99**, 030501 (2007).
- [57] J. Du, J. Zhu, M. Shi, X. Peng, D. Suter, Phys. Rev. A **76**, 042121 (2007).
- [58] A. Mitra, T. S. Mahesh, A. Kumar, J. Chem. Phys. **128** 124110 (2008).
- [59] N. Boulant, E. M. Fortunato, M. A. Pravia, G. Teklemariam, D. G. Cory e T. F. Havel, Phys. Rev. A **65**, 024302 (2004).
- [60] J. Baugh, O. Moussa, C. A. Ryan, A. Nayak, R. Laflamme, Nature **438**, 470 (2005).
- [61] J. Baugh, O. Moussa, C. A. Ryan, R. Laflamme, C. Ramanathan, T. F. Havel, D. G. Cory, Phys. Rev. A **73**, 022305 (2005).
- [62] J. Teles, R. Aucçaise, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira, T. J. Bonagamba, J. Chem. Phys. **126**, 154506 (2007).
- [63] H. Kampermann, W. S. Veeman, J. Chem. Phys. **122**, 214108 (2005).
- [64] K. Kobzar, B. Luy, N. N. Khaneja, S. J. Glaser, J. Magn. Res. **173**, 229 (2005).
- [65] T. Vosegaard, C. T. Kehlet, N. Khaneja, S. J. Glaser, N. C. Nielsen, J. Am. Chem. Soc. **127**, 13768 (2005).
- [66] C. Kehlet, M. Bjerring, A. C. Sivertsen, T. Kristensen, J. J. Enghild, S. J. Glaser, N. Khaneja, N. C. Nielsen, J. Magn. Res. **188**, 216 (2007).
- [67] M. Möttönen, R. de Souza, J. Zhang, K. B. Whaley, Phys. Rev. A **73**, 022332 (2006).
- [68] A. C. Soares, *Engenharia de pulsos para o processamento de informacão quântica através de RMN*. (Dissertação de mestrado) CBPF (2012).
- [69] N. A. Gershenfeld, I. L. Chuang, Science **275**, 350 (1997).
- [70] D. G. Cory, A. F. Fahmy, T. F. Havel, Proc. Natl. Acad. Sci. Usa **94**, 1634 (1997).
- [71] M. Kawamura, B. Rowland e J. A. Jones, Phys. Rev. A **82**, 032315 (2010).
- [72] W. S. Warren, Science **277**, 1688 (1997).
- [73] N. A. Gershenfeld, I. L. Chuang, Science **277**, 1689 (1997)
- [74] I. L. Chuang, N. Gershenfeld, M. G. Kubinec, D. W. Leung, Proc. Roy. Soc. Lond. A **454**, 447 (1998).

- [75] M.H. Levitt. *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance* (John Wiley and Sons, EUA, 2008).
- [76] M. Pravia, E. Fortunato, Y. Weinstein, M. D. Price, G. Teklemariam, R. J. Nelson, Y. Sharf, S. Somaroo, C. H. Tseng, T. F. Havel, D. G. Cory, *Concepts in Magnetic Resonance* **11**, 225 (1999).
- [77] G. M. Leskowitz, L. J. Muller, *Phys. Rev. A* **69**, 052302 (2004).
- [78] M. H. Y. Moussa, *Phys. Rev. A* **55**, R3287 (1997).
- [79] L. Davidovich, N. Zagury, M. Brune, J. M. Raimond, S. Haroche. *Phys. Rev. A* **50**, R895 (1994).
- [80] W. Zurek. *Physics Today* **44**, 36 (1991).
- [81] M. A. Nielsen, E. Knill, R. Laflamme. *Nature* **396**, 52 (1998).
- [82] G. Teklemariam, E. M. Fortunato, M. A. Pravia, T. F. Havel e D. G. Cory. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5845 (2001).
- [83] M. Munowitz. *Coherence and NMR*. (John Wiley and Sons, EUA, 1988).
- [84] I. Bengtson, K. Zyczkowski. *Geometry of Quantum States: An Introduction to Entanglement*. (Cambridge University Press, 2006).
- [85] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 865(2009).
- [86] A. Peres. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413 (1996).
- [87] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki. *Physics Letters A* **223**, 1 (1996).
- [88] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu e B. Shumacher. *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
- [89] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin e W. K. Wootters. *Phys. Rev. A* **54**, 3824 (1996).
- [90] W. K. Wootters. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
- [91] F. Mintert, A. R. R. Carvalho, M. Kus e A. Buchleitner. *Phys. Rep.* **415**, 207 (2005).
- [92] J. R. Gittings e A. J. Fisher. arXiv:quant-ph/0302018 (2003).
- [93] K. Audenaert, F. Verstraete e B. DeMoor. *Phys. Rev. A* **64**, 052304 (2001).
- [94] F. G. S. L. Brandão e R. O. Vianna. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 22050 (2004).

- [95] G. Vidal e R. Tarrach. Phys. Rev. A **59**, 141 (1999).
- [96] M. Steiner. Phys. Rev. A **67**, 054305 (2003).
- [97] F. G. S. L. Brandão, Phys. Rev. A **72**, 022310 (2005).
- [98] F. G. S. L. Brandão, Phys. Rev. A **76**, 030301(R) (2007).
- [99] D. Cavalcanti, F. G. S. L. Brandão, M. O. Terra Cunha, New Journal of Physics **8**, 260 (2006).
- [100] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu e R. Schack. Phys. Rev. Lett. **83**, 1054 (1999).
- [101] C. Nevergrene, T. S. Mahesh, C. A. Ryan, M. Ditty, F. Cyr-Racine, W. Power, N. Boulant, T. Havel, D. G. Cory e R. Lafflame. Phys. Rev. Lett. **96**, 170501 (2006).
- [102] N. Linden e S. Popescu. Phys. Rev. Lett. **87**, 047901 (2001).
- [103] R. Schack e C. M. Caves. Phys. Rev. A **60**, 4354 (1999).
- [104] N. C. Menicucci e C. M. Caves. Phys. Rev. Lett. **88**, 167901 (2002).
- [105] N. C. Menicucci. *Local realistic hidden-variable model for the states and dynamics of liquid-state NMR information processing*. [Http://panda.unm.edu/AcadAdv/honorsTheses/NickMRHonorsThesis.pdf](http://panda.unm.edu/AcadAdv/honorsTheses/NickMRHonorsThesis.pdf) (não publicado).
- [106] G. J. Milburn, R. Laffamme, B. C. Sanders e E. Knill. Phys. Rev. A **65**, 032316 (2002).
- [107] X. Fang, X. Zhu, M. Feng, X. Mao, J. Du. Phys. Rev. A **61**, 022307 (2002).
- [108] G. Brassard, S. L. Braunstein, R. Cleve. Physica D **120**, 43 (1998).
- [109] C. H. Bennett e S. J. Wiesner. Phys. Rev. Lett. **69**, 2881 (1992).
- [110] M. Zukowski e C. Brukner. Phys. Rev. Lett. **88**, 210401 (2002).
- [111] R. F. Werner e M. M. Wolf. Phys. Rev. A **64**, 032112 (2001).
- [112] K. Nagata, W. Laskowski e T. Paterek. Phys. Rev. A **74**, 062109 (2006).
- [113] A. Aspect. arXiv:quant-ph/0402001 (2004).
- [114] P. Hyllus, O. Gühne, D. Brub e M. Lewenstein. Physical Review A **72**, 012321 (2005).
- [115] M. Wiesniak, V. Vedral e C. Brukner. New Journal of Physics **7**, 258 (2005).

- [116] A. M. Souza, D. O. Soares-Pinto, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira, M. S. Reis, P. Brandão e A. M. dos Santos. *Physical Review B* **79**, 054408 (2009).
- [117] L. Gurvits. *Proceedings of the thirty-fifth ACM Symposium on the Theory of Computing* (ACM Press, New York, 2003), pp. 10.
- [118] A. Ben Tal e A. Nemirovski. *Robust Convex Optimization*, *Math. Operat. Res.*, **23**, pp. 769 (1998).
- [119] R. Rahimi, K. Takeda, M. Ozawa e M. Kitagawa. *Journal of Physics A: Math. and Gen.* **39**, 2151 (2006).
- [120] M. D. Lang e C. M. Laves. *Physical Review Letters* 105, 150501 (2010).
- [121] T. Maciel, A. T. Cesario e R. O. Vianna. *Int. J. of Modern Physics C* **22**, No. 22 p. 1 (2011).
- [122] N. Bohr, *Discussion with Einstein on epistemological problems in atomic physics*, em *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*. p. 199. (Library of Living Philosophers, Evanston, EUA, 1949).
- [123] Y. Aharonov e D. Rohrlich. *Quantum Paradoxes*. (Wiley-VCH, Weinheim, Alemanha, 2005).
- [124] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki, and H. Ezawa, *Am. J. Phys.* **57**, 117 (1989).
- [125] J. Summhammer, G. Badurek, H. Rauch, U. Kischko, and A. Zeilinger. *Phys. Rev. A* **27**, 2523 (1983).
- [126] O. Carnal and J. Mlynek. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2689 (1991).
- [127] D. W. Keith, C. R. Ekstrom, Q. A. Turchette, and D. E. Pritchard. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2693 (1991).
- [128] M. Arndt *et al.*. *Nature* **401**, 680 (1999).
- [129] X. Peng, X. Zhu, D. Suter, J. Du, M. Liu, and K. Gao. *Phys. Rev. A* **72**, 052109 (2005).
- [130] X. Peng, J. Zhang, J. Du, D. Suter. *Phys. Rev. A* **77**, 052107 (2008).
- [131] A. Ekert, P. Hayden e H. Inamori. arXiv:quant-ph/0011013v1 (2000).
- [132] P. Grangier, G. Roger and A. Aspect. *Europhysics Letters* **1**, 173 (1986).

- [133] R. Cleve, A. Ekert, C. Macchiavello and M. Mosca, Proc. R. Soc. Lond. A **454**, 339 (1998).
- [134] C. Miquel, J. P. Paz, M. Saraceno, R. Laflamme, E. Knill and C. Negrevergne. Nature **418**, 59 (2002).
- [135] J. A. Wheeler e W. Zurek, *Quantum Theory and Measurement*. (Princeton Univ. Press, Princeton, 1984).
- [136] F. Jelezko, A. Volkmer, I. Popa, K. K. Rebane, J. Wrachtrup. Phys. Rev. A **67**, 041802 (2003).
- [137] A. Zeilinger, G. Weihs, T. Jennewein, M. Aspelmeyer. Nature **433**, 230 (2005).
- [138] T. Aichele, U. Herzog, M. Scholtz, O. Benson, AIP Conf. Proc. **750**, 35 (2005).
- [139] V. Jacques et al., Eur. Phys. J. D **35**, 561 (2005).
- [140] H.-A. Bachor, T. C. Ralph, *A Guide to Experiments in Quantum Optics* (Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2004).
- [141] A. Brandenburger e N. Yanofsky, J. Phys. A **41**, 425302 (2008);
- [142] F. Kaiser et al. Material suplementar disponível em <http://www.sciencemag.org/content/suppl/2012/11/01/338.6107.637.DC1.html>.
- [143] S. P. Walborn, M. O. Terra Cunha, S. Pádua, C. H. Monken. Phys. Rev. A **65**, 033818 (2002).
- [144] S. Lloyd. Science **338**, 621 (2012).
- [145] B. G. Englert, Phys. Rev. Lett. **77**, 2154 (1996).
- [146] P. Kumar and S. R. Skinner. Phys. Rev. A **76**, 022335 (2007).
- [147] R. F. Werner, Phys. Rev. A **40**, 4277 (1989).
- [148] R. Auccaise *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 140403 (2011).
- [149] R. Auccaise *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 070501 (2011).
- [150] D. O. Soares-Pinto, L. C. Céleri, R. Auccaise, F. F. Fanchini, E. R. deAzevedo, J. Maziero, T. J. Bonagamba and R. M. Serra, Phys. Rev. A **81**, 062118 (2010).
- [151] S. Lloyd, Science **273**, 1073 (1996).

- [152] S. Somaroo, C. H. Tseng, T. F. Havel, R. Laflamme e D. G. Cory. Phys. Rev. Lett. **82**, 5381 (1999).
- [153] C. Negrevergne, R. Somma, G. Ortiz, E. Knill e R. Laflamme. Phys. Rev. A **71**, 032344 (2005).
- [154] Xinhua Peng, Jiangfeng Du e Dieter Suter. Phys. Rev. A **71**, 012307 (2005).
- [155] Jiangfeng Du, Nanyang Xu, Xinhua Peng, Pengfei Wang, Sanfeng Wu e Dawei Lu. Phys. Rev. Lett. **104**, 030502 (2010).
- [156] Dawei Lu, Nanyang Xu, Ruixue Xu, Hongwei Chen, Jiangbin Gong, Xinhua Peng e Jiangfeng Du. Phys. Rev. Lett. **107**, 020501 (2011).
- [157] R. Gerritsma, B. P. Lanyon, G. Kirchmair, F. Zähringer, C. Hempel, J. Casanova, J. J. García-Ripoll, E. Solano, R. Blatt e C. F. Roos. Phys. Rev. Lett. **106**, 060503 (2011).
- [158] K. Singer, U. Poschinger, M. Murphy, P. Ivanov, F. Ziesel, T. Calarco e F. Schmidt-Kaler. Rev. Mod. Phys. **82**, 2609 (2010).
- [159] M. Huo, C. Noh, B. M. Rodríguez-Lara e D. G. Angelakis. Phys. Rev. A **86**, 043840 (2012).
- [160] A. Riera, C. Gogolin e J. Eisert. Phys. Rev. Lett. **108**, 080402 (2012).
- [161] D. Poulin e P. Wocjan. Phys. Rev. Lett. **103**, 220502 (2009).
- [162] K. Temme, T.J. Osborne, K.G. Vollbrecht, D. Poulin e F. Verstraete. Nature **471**, 87 (2011).
- [163] J. Zhang, M. Yung*, R. Laflamme, A. Aspuru-Guzik e J. Baugh. Nat. Commun. **3**, 880 (2012).
- [164] J. F. Cornwell. *Group Theory in Physics*, Vol. 1. (Academic Press, Amsterdam, 1997).
- [165] L. Landau, E. Lifshitz e L. Pitaevskii, *Statistical Physics* (Pergamon Press, Oxford, 1980), 3rd ed., Pt. 1.
- [166] D. S. Abrams e S. Lloyd. Phys. Rev. Lett. **83**, 5162 (1999).
- [167] M. J. Thrippleton e J. Keeler. Angewandte Chemie **42**, 3938 (2003).
- [168] K. E. Cano, M. J. Thrippleton, J. Keeler e A. J. Shaka. Journal of Magnetic Resonance **167**, 291 (2004).

- [169] M. A. Continentino. *Quantum Scaling in Many-Body Systems*. (World Scientific, Londres, 2001).
- [170] T. Werlang, C. Trippe, G. A. P. Ribeiro e G. Rigolin. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 095702 (2010).
- [171] Hermann Kampermann, Dagmar Bruß, Xinhua Peng e Dieter Suter. *Phys. Rev. A* **81**, 040304 (2010).
- [172] Gemmer, J. et al.: *Quantum Thermodynamic Processes*. *Lect. Notes Phys.* **784**, 291 (2009).
- [173] T. D. Kieu. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 140403 (2004).
- [174] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, 1955).
- [175] E. Schrödinger, *Statistical Thermodynamics* (Dover, New York, 1989).
- [176] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1999).
- [177] J. Arnaud, L. Chusseau, and F. Philippe, arXiv:quant-ph/0211072 (2003).
- [178] H. E. D. Scovil e E.O. Schulz-DuBois, *Phys. Rev. Lett.* **2**, 262 (1959).
- [179] J. Du, L. Hu, Y. Wang, J. Wu, M. Zhao e D. Suter. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 060403 (2008).