Tese de Doutorado

Um Estudo de Emaranhamento e Desigualdades de Bell em Sistemas Térmicos Magnéticos

Alexandre Martins de Souza

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/MCT

Rio de Janeiro, Junho de 2008

Agradecimentos

Inicialmente gostaria de agradecer aos Professores Roberto Sarthour e Ivan Oliveira pela amizade e orientação. Também quero agradecer aos Professores Tito Bonagamba, Eduardo de Azevedo e ao Doutor Alvicler Magalhães pela ajuda fundamental na realização dos experimentos de RMN. Igualmente importante foi o Professor Mário Reis, fundamental para a obtenção dos resultados experimentais referentes ao estudo do emaranhamento térmico. Um agradecimento especial também para o Professor Alberto Passos Guimarães que me orientou no primeiro ano do doutorado. A todos os estudantes que estiveram comigo durante o doutorado: André Gavini, Diogo Soares Pinto, Juan Bulnes, Suenne Machado, Ruben Auccaise e Valter Lima do CBPF. João Teles, Fábio Bonk, Carlos Brasil e Arthur Ferreira de São Carlos. A todos os laboratórios e instituições que possibilitaram a realização desta tese: o CBPF, o IFSC da USP em São Carlos, o FFCLRP da USP em Ribeirão Preto, o LNLS em campinas, a Bruker BioSpin da Alemanha e a Universidade de Aveiro em Portugal. Ao CNPq e ao Instituto do Milênio de Informação Quântica pelo suporte financeiro e a todos que possibilitaram minha trajetória.

Resumo

Esta tese é o conjunto de dois trabalhos distintos relacionados com o mesmo fenômeno físico, o *emaranhamento*. No primeiro trabalho, desenvolvemos um método para simular testes das desigualdades de Bell utilizando spins nucleares. O procedimento de simulação pode ser usado para simular e testar resultados de diferentes desigualdades de Bell, com configurações distintas e com vários q-bits. Acreditamos que este método possa ser útil no teste de desigualdades que não são triviais de serem realizadas com outras técnicas.

Para ilustrar o método, realizamos um experimento de RMN, onde estudamos a violação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt utilizando um sistema de spins nucleares contendo dois q-bits. Os resultados foram comparados com um experimento realizado com fótons pelo grupo de Alain Aspect na década de 80 e com um modelo de variáveis ocultas proposto para RMN [Menicucci e Caves *Phys. Rev. Lett.* **88** 167901 (2002)]. Até onde sabemos, esta foi a primeira vez que um modelo de variáveis ocultas foi comparado explicitamente com dados experimentais.

O segundo trabalho que compõe esta tese é um estudo sobre o emaranhamento térmico em uma cadeia de spins formada no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. A presença do emaranhamento foi investigada através de duas quantidades, uma testemunha de emaranhamento e o emaranhamento da formação, ambas derivadas da susceptibilidade magnética. Além da observação experimental do emaranhamento através de estudos da susceptibilidade magnética, também realizamos um estudo teórico sobre o comportamento do emaranhamento em função do campo aplicado e temperatura.

Abstract

This thesis is composed of two distinct studies involving the same phenomena, the *entanglement*. In the first one, a method for simulating Bell's inequalities tests was developed in a NMR system, i.e. using nuclear spins. The simulation procedure can be used to simulate a variety of Bell's inequalities, with distinct configurations and several qubits. We also believe that this method may be useful in order to test non-trivial Bell's inequalities, which are difficult to be performed using others techniques.

In order to illustrate the method developed in this first study, a NMR experiment was done, in which the violation of the Clauser, Horne, Shimony and Holt inequality was studied using a nuclear spin system containing two qubits. The results were compared to an experiment performed using photons by the Alain Aspect in the eighties, and also to a hidden variables model, specially developed for NMR [Menicucci e Caves *Phys. Rev. Lett.* **88** 167901 (2002)]. To the best of our knowledge, this is the first time that a hidden variables model is explicity compared to experimental results.

The second work present in this thesis is a study of thermal entanglement in a spin chain, formed in the compound $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. The presence of entanglement in the system was investigated through two quantities, a entanglement witness and the entanglement of formation, both derived from the magnetic susceptibility. Besides the experimental determination of entanglement through the magnetic susceptibility, a theoretical study of entanglement evolution as a function of temperature and the applied magnetic field is also present.

Sumário

Lista de Figuras **vii**

Lista de Tabelas **xi**

1 Introdução **1**

2 Introdução ao emaranhamento **6**

2.1 Definição matemática de emaranhamento 6

2.2 Critérios de separabilidade 8

2.3 Quantificação do emaranhamento de pares 9

2.3.1 Estados puros 10

2.3.2 Estados mistos 10

2.4 Quantificação do emaranhamento de sistemas multipartidos 15

2.5 Testemunhas de emaranhamento 16

2.6 Desigualdades de Bell 16

2.6.1 Clauser, Horne, Shimony e Holt 18

2.6.2 Testes experimentais 20

2.6.3 Desigualdades de Bell generalizadas 22

2.6.4 Desigualdade temporal de Bell 24

3 Emaranhamento como um recurso computacional **26**

3.1 Processamento de informação 27

3.1.1 Computação clássica 27

3.1.2 Computação quântica 30
3.1.3 Algoritmos quânticos 34
3.1.3.1 Algoritmos com ganho exponencial de velocidade 35
3.1.3.2 Algoritmos com ganho polinomial de velocidade 36
3.1.3.3 Simulações de sistemas quânticos 37
3.1.4 O poder da computação quântica 40
3.2 Comunicação quântica 41
3.2.1 Codificação superdensa 42
3.2.2 Teleporte 43
3.2.3 Troca de emaranhamento 46
3.2.4 Desigualdades de Bell e comunicação 47
3.3 Criptografia quântica 49
3.4 Metrologia quântica 53

4 Desigualdades de Bell com RMN **55**
4.1 Introdução à computação quântica por RMN 56
4.1.1 Q-bits 56
4.1.2 Portas lógicas quânticas 58
4.1.3 Estados pseudo puros 61
4.1.4 Separabilidade dos estados pseudo puros 62
4.1.5 Tomografia de estado quântico 63
4.1.6 Relaxação 65
4.1.7 Aparato experimental 66
4.2 Resultados 68
4.2.1 Método para simular desigualdades de Bell com RMN 68
4.2.2 Modelo de variáveis ocultas para RMN 71

4.2.3 Experimento de simulação da desigualdade de CHSH 75
4.3 Conclusões 84

5 Emaranhamento em uma cadeia de spins **87**
5.1 Emaranhamento térmico 87
5.2 Testemunhas de emaranhamento termodinâmicas 90
5.3 O composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$ 92
5.4 Resultados 95
5.4.1 Emaranhamento sem campo aplicado 95
5.4.1.1 Testemunha de emaranhamento 95
5.4.1.2 Emaranhamento da formação 96
5.4.2 O efeito do campo magnético 100
5.5 Conclusões 101

6 Conclusões e perspectivas **103**

Apêndice A – Portas lógicas quânticas **107**

Apêndice B – Referencial múltiplo girante **110**

Apêndice C – Programas em MATLAB **114**
C.1 Programas de simulação com a mecânica quântica 114
C.2 Programas de simulação com as variáveis ocultas 123
C.3 Programas de tomografia 132
C.4 Programas para o estudo do emaranhamento térmico 135

Referências **139**

Lista de Figuras

2.1 Visão esquemática de uma medida de emaranhamento baseada na distância entre estados. 14

2.2 Visão esquemática das testemunhas de emaranhamento, mostrando a diferença entre uma testemunha otimizada EW_{opt} e outra não otimizada EW. 17

2.3 Teste experimental de teorias realísticas não-locais. Os pontos são dados experimentais, a linha tracejada é o limite imposto por teorias realísticas não-locais e a linha sólida é a previsão da mecânica quântica. 22

3.1 Representação dos elementos básicos de um circuito quântico (a) Bit quântico; (b)Bit clássico; (c) Porta lógica de um q-bit; (d) Porta lógica controlada, onde a operação U é aplicada sobre o segundo q-bit se o primeiro estiver no estado $|1\rangle$; (e) Porta lógica controlada, onde a operação U é aplicada sobre o segundo q-bit se o primeiro estiver no estado $|0\rangle$; (f) Um processo de medida. 31

3.2 Circuito quântico Gerador de EPR e sua tabela verdade. 32

3.3 Circuito quântico Leitor de EPR e sua tabela verdade. 32

3.4 Circuito quântico da transformada de Fourier quântica. 36

3.5 Molécula utilizada na implementação do algoritmo de Shor. Os q-bits são os cinco núcleos dos átomos de ^{19}F, indicados pela cor vermelha, e os 2 núcleos dos átomos de ^{13}C, indicados pela cor azul. 37

3.6 Representação do circuito de espalhamento 39

3.7 Esquema do protocolo de codificação superdensa. 42

3.8 Esquema do protocolo de teleporte. 44

3.9 Circuito quântico do protocolo de teleporte. 44

3.10 Esquema do protocolo de troca de emaranhamento. 46

3.11 Cifrador de Vernam. Neste exemplo, as letras do alfabeto são associadas a números. A mensagem QUANTUM é encriptada adicionando a chave CRYPTOS. O resultado é a mensagem SNIEOPG, enviada pelo canal público. Somente quem possui a chave CRYPTOS pode decodificar corretamente a mensagem original. 50

4.1 Níveis de energia de um spin 1/2 imerso em um campo magnético constante. 57

4.2 Níveis de energia e o espectro de RMN do clorofórmio. 58

4.3 Arquitetura básica de um espectrômetro de RMN. 67

4.4 Circuito quântico para simular a função de correlação (4.27). 70

4.5 Comparação entre a parte real do desvio das matrizes densidades experimentais e teóricas para os estados pseudo puros: (a) $|00\rangle$, (b) $|01\rangle$, (c) $|10\rangle$ e (d) $|11\rangle$. 77

4.6 Comparação entre a parte real do desvio das matrizes densidades experimentais e teóricas para os estados pseudo emaranhados: (a) $|\phi^+\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$, (b) $|\psi^+\rangle = (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$, (c) $|\psi^-\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$ e (d) $|\phi^-\rangle = (|00\rangle - |11\rangle)/\sqrt{2}$. 78

4.7 Comparação entre a parte real do desvio da matriz densidade experimental e teórica para o estado pseudo puro $(|00\rangle + |11\rangle + |01\rangle + |10\rangle)/2$. 79

4.8 Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para o estado $|\phi^+\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. (●) são pontos experimentais de RMN, (■) são pontos extraídos de um experimento realizado com fótons e a linha sólida é a previsão da mecânica quântica. 80

4.9 Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para os estados (a) $|00\rangle$ e (b)$(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$. (●) são pontos experimentais e a linha sólida é a previsão do modelo realístico-local. 81

4.10 Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para os estados (a) $(|00\rangle - |11\rangle)/\sqrt{2}$ e (b) $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$. (●) são pontos experimentais e a linha sólida é a previsão do modelo realístico-local. 82

4.11 Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para os estados (a) $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ e (b)$(|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$. (•) são pontos experimentais e a linha sólida é a previsão do modelo realístico-local. 83

4.12 Simulação computacional da violação da desigualdade (2.3) para vários valores de polarização ϵ. A linha sólida representa o limite imposto por modelos realísticos. Os pontos acima da linha sólida não possuem uma descrição realística. 85

5.1 Susceptibilidade magnética do composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$. (▲) Dados Experimentais. • Cálculo teórico utilizando o emaranhamento quântico. (•) Calculo teórico utilizando aproximações semi-clássicas. (•) Cálculo teórico utilizando física clássica 89

5.2 Estrutura do composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$ ilustrada de dois pontos de vista. Os círculos menores (vermelhos) representam os átomos de oxigênio e os círculos maiores (azuis) representam os átomos de cobre. Em (a) ilustramos a vista lateral e em (b) mostramos a visão superior da cadeia. 94

5.3 Representação esquemática do sistema dímero-trímero. 94

5.4 Susceptibilidade magnética em função da temperatura com campo aplicado de 100 Oe. Os pontos (•) são os resultados experimentais e a linha sólida é a previsão teórica, baseada na equação (5.1). 95

5.5 Testemunha de emaranhamento para o sistema total $EW(5)$ (•), para o trímero $EW(3)$ (▲) e para o dímero $EW(2)$ (*). 97

5.6 Emaranhamento da formação determinado experimentalmente no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. (a) para o par $1-2$, (b) para o par $2-3$ e (c) para o par $1-3$. A linha sólida é a previsão teórica. O pequeno desvio entre a teoria e o experimento a baixas temperaturas está associado a uma transição do material para a fase 3D. 100

5.7 (a) Emaranhamento da formação para os pares $1-2$ e $2-3$ em função da temperatura e campo aplicado. (b) Emaranhamento da formação em função do campo aplicado, para algumas temperaturas selecionadas. . . 101

5.8 (a) Emaranhamento da formação para o par $1-3$, em função da temperatura e campo aplicado. (b) Emaranhamento da formação em função do campo aplicado, para algumas temperaturas selecionadas. 102

Lista de Tabelas

3.1 Tabela verdade da porta clássica AND. 28

3.2 Tabela verdade da porta clássica OR. 28

5.1 Autovalores da Hamiltoniana (5.1), sem campo aplicado. Os autovalores são mostrados em ordem crescente, ou seja, o primeiro autovalor é o de menor energia. 93

A.1 Definições das principais portas de um q-bit. 107

A.2 Tabelas verdade das principais portas de um q-bit. 108

A.3 Definições das principais portas de dois q-bits. A fase ϕ que aparece na seqüência de implementação da porta de fase controlada é uma fase arbitrária. 109

A.4 Tabelas verdade das principais portas de dois q-bits. 109

1

Introdução

A mecânica quântica, juntamente com a teoria da relatividade, é um dos pilares da física moderna. Desde a sua criação no início do século XX, inúmeros experimentos têm confirmado suas previsões nos mais variados tipos de sistemas, e diversas aplicações tecnológicas foram desenvolvidas. Após um século de testes realizados com sucesso, não se pode duvidar da validade da mecânica quântica. Porém, apesar de ser uma das teorias mais bem sucedidas da física, muitas questões fundamentais permanecem sem resposta. Uma das mais interessantes, é a questão que se refere ao seu caráter probabilista. Em geral, a teoria quântica não é capaz de prever o valor de quantidades físicas de objetos individuais. Não se pode por exemplo, prever com a mecânica quântica a posição de um elétron em um átomo em um instante de tempo, sendo possível apenas inferir a probabilidade dele ser encontrado em uma região específica. A questão fundamental que surge é se este caráter probabilista é inevitável (esta é a visão não-epistêmica, isto é, a visão de que a natureza é intrinsecamente probabilista) ou se a mecânica quântica é meramente uma aproximação estatística (visão epistêmica) de uma teoria mais geral. Na visão epistêmica, o caráter probabilista surge devido ao desconhecimento a respeito de alguns parâmetros, que são chamados de variáveis ocultas. Assim, nesta interpretação, a mecânica quântica simplesmente ofereceria um conjunto de regras matemáticas capazes de prever corretamente a estatística de um conjunto de partículas, sendo que as variáveis ocultas determinariam o valor das quantidades físicas de cada partícula do conjunto.

O trabalho fundamental onde esta questão emerge claramente apareceu em 1935, e foi assinado por Albert Einstein, Boris Podolsky e Natan Rosen [1]. Neste artigo, os autores defenderam que a mecânica quântica é uma teoria incompleta e que uma descrição em termos de variáveis ocultas seria plausível. Esta visão fica clara no último parágrafo do

artigo, onde os autores escreveram:

"*Ao mesmo tempo que mostramos que a função de onda não oferece uma descrição completa da realidade física, deixamos em aberto a questão se tal descrição existe ou não. Nós acreditamos, entretanto, que tal teoria é possível.*"[1]

Posteriormente, se verificou que o problema apontado por Einstein, Podolsky e Rosen está fundamentalmente relacionado ao conceito de realismo local [2], ou seja, a hipótese de que objetos físicos possuem propriedades definidas que independem do processo de observação, e de que uma medida feita por um observador não pode influenciar medidas feitas por outro observador (se estes estiverem separados de modo que não possam trocar informações entre si.).

Em 1964 John Bell descobriu uma incompatibilidade entre a mecânica quântica e o conceito de realismo local [3]. Bell mostrou que é impossível construir um modelo realístico-local de variáveis ocultas compatível com todas as previsões da mecânica quântica. Matematicamente, esta incompatibilidade tomou a forma de um conjunto de desigualdades, hoje conhecidas como desigualdades de Bell, que podem ser violadas apenas por sistemas emaranhados. Desde a década de 70, violações das desigualdades de Bell têm sido observadas em diversos experimentos (ver seção 2.6.2). Para muitos, esses experimentos indicam claramente que as idéias contidas no realismo local, bem como qualquer tentativa de construir um modelo de variáveis ocultas que reproduza a mecânica quântica em todos os sentidos, devem ser abandonadas. Entretanto, devido à alguns problemas experimentais ainda não resolvidos, há controvérsias que apresentaremos em mais detalhe na seção 2.6.2. Apesar de alguns ainda argumentarem em favor das variáveis ocultas, experimentos cada vez mais sofisticados têm demonstrado violações das desigualdades de Bell. Estes resultados deixam cada vez menos espaço para as teorias de variáveis ocultas. Acreditamos que a melhor visão sobre os problemas experimentais que persistem foi dada pelo próprio Bell [4], que escreveu:

"*... É dificil para eu acreditar que a mecânica quântica funciona tão bem com aparatos experimentais ineficientes e ainda irá falhar terrívelmente quando refinamentos suficientes forem feitos.* "[2]

[1] "*While we have thus shown that the wave function does not provide a complete description of the physical reality, we left open the question of whether or not such a description exists. We believe, however, that such a theory is possible.*"

[2] "*... it is hard for me to believe that quantum mechanics works so nicely for inefficient practical set-ups and is yet going to fail badly when sufficient refinements are made.* "

Durante muitos anos, o interesse sobre emaranhamento estava principalmente relacionado com questões fundamentais. Porém, com o recente avanço da ciência da informação quântica, novas aplicações para o emaranhamento foram desenvolvidas. Um dos resultados mais impactantes foi a descoberta de que o emaranhamento é um recurso físico com o qual podemos realizar tarefas de processamento e transmissão de informação. Além de resultar em importantes aplicações práticas, a relação entre emaranhamento e a ciência da computação estabelece uma interessante conexão entre dois campos que "aparentemente"seriam totalmente descorrelacionados: a computação e a física quântica. Dizemos "aparentemente", pois desde o início da computação clássica, e seus dispositivos, que permitiram a construção de processadores e computadores, que a física está intrinsecamente correlacionada com a computação. No entanto, a conexão que aparece aqui é de natureza mais fundamental.

Exemplos explícitos, e extremamente interessantes, onde a física fundamental encontra a ciência da computação são as conexões existentes entre as desigualdades de Bell e os protocolos de comunicação e criptografia quântica. Além disso, o emaranhamento é apontando como sendo o recurso físico responsável pelo ganho exponencial de velocidade dos computadores quânticos sobre os computadores clássicos. No campo da metrologia, vários esquemas que utilizam emaranhamento para realizar medidas precisas têm sido propostos. Todas estas aplicações serão discutidas em mais detalhe no capítulo 3.

Características genuinamente quânticas, tal como o emaranhamento, geralmente não são observadas além da escala atômica e em altas temperaturas. No entanto, recentemente foi descoberto que estados emaranhados podem existir em sólidos a temperaturas finitas. Este tipo de emaranhamento é chamado na literatura de "Emaranhamento Térmico" [5, 6]. Resultados recentes têm demonstrado que o emaranhamento pode ser uma peça importante para o entendimento dos fenômenos observados em sistemas de estado sólido. Uma evidência de que o emaranhamento é importante para o entendimento da física dos sólidos está presente no trabalho de Ghosh *et al.* [7], onde foi demonstrado que o emaranhamento é o ingrediente fundamental para a explicação do comportamento da susceptibilidade magnética no composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$ a baixas temperaturas. Além disso, o estudo do emaranhamento que ocorre naturalmente em sólidos é de grande relevância para a computação quântica pois muitas propostas de chips quânticos são baseadas em sistemas de estado sólido. Também há propostas de utilização de materiais que possuem emaranhamento natural como fontes de emaranhamento. Neste novo cenário

surge então uma outra interessante conexão entre dois campos de pesquisa extremamente importantes: a física do estado sólido e a teoria da informação e computação quântica.

Seja pelo interesse nas propriedades fundamentais ou nas aplicações, a importância do emaranhamento tem sido evidenciada no crescente número de artigos publicados na literatura.

Nesta tese apresentamos dois trabalhos distintos relacionados com o estudo do emaranhamento. No primeiro trabalho, desenvolvemos um método para simular experimentos de ótica, onde os spins nucleares fazem o papel dos fótons e suas possíveis orientações em relação ao campo magnético aplicado fazem o papel das polarizações dos campos elétricos dos fótons. O procedimento de simulação pode ser usado para simular e testar resultados de diferentes desigualdades de Bell, com configurações distintas e com vários q-bits. Acreditamos que este método possa ser útil no teste de desigualdades que não são triviais de serem feitas com outras técnicas.

Para ilustrar o método, realizamos um experimento de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), onde estudamos a violação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt (CHSH) [8] utilizando um sistema de spins nucleares de dois q-bits. A desigualdade de CHSH foi proposta em 1969 para ser utilizada diretamente em experimentos. A desigualdade original proposta por Bell mostra uma contradição matemática entre a mecânica quântica e a hipótese do realismo local. Porém, não permite um teste experimental se houver imperfeições no aparato experimental. No entanto, a desigualdade de CHSH corrige este problema, permitindo um teste experimental uma vez que imperfeições no aparato estejam dentro de um certo limite. Esta forma de desigualdade de Bell, que será explicada em detalhe na seção 2.6.1, é a mais estudada e testada experimentalmente.

Os resultados foram comparados com um dos famosos experimentos [9] realizados com fótons pelo grupo do Alain Aspect na década de 80 e com um modelo de variáveis ocultas desenvolvido especialmente para a RMN [10]. Até onde sabemos, esta foi a primeira vez que um modelo de variáveis ocultas foi explicitamente comparado com dados experimentais.

O segundo trabalho que compõe esta tese é um estudo sobre o emaranhamento térmico em uma cadeia de spins formada no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. A presença do emaranhamento foi investigada através de duas quantidades, uma testemunha de emaranhamento e o emaranhamento da formação, ambas derivadas da susceptibilidade magnética. Além

da observação experimental do emaranhamento através da susceptibilidade magnética, também realizamos um estudo teórico sobre o comportamento do emaranhamento em função do campo aplicado e temperatura.

Esta tese está organizada da seguinte forma: Os dois primeiros capítulos são destinados a uma revisão dos principais tópicos relacionados ao emaranhamento. No capítulo 2 resumiremos alguns dos resultados mais relevantes referentes à sua caracterização, onde temas como critérios de separabilidade, detecção, quantificação e classificação de estados emaranhados serão abordados. Ao final do capítulo 2, discutiremos o tema Desigualdades de Bell.

No capítulo 3 resumiremos de forma concisa algumas aplicações do emaranhamento. O capítulo contem os conceitos básicos de computação − clássica e quântica −, comunicação e criptografia quântica, explorando a relação entre emaranhamento e o processamento da informação, bem como sua transmissão. No final do capítulo descrevemos uma aplicação do emaranhamento à metrologia.

Nos capítulos seguintes, 4 e 5, são apresentados os resultados referentes ao experimento de simulação das desigualdades de Bell por RMN e ao estudo do emaranhamento térmico na cadeia de spins formada no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$, respectivamente. No capítulo 6, conclusões finais e algumas perspectivas são apresentadas.

A produção bibliográfica originada por esta tese consiste de três artigos científicos e um artigo de divulgação:

- A.M. Souza *et al.*, NMR Analog of Bell's Inequalities Violation Test, *New Journal of Physics* **10** (2008) 033020.
- A.M. Souza *et al.*, Observation of Thermal Entanglement in Spin Clusters via Magnetic Susceptibility Measurements, *Physical Review B* **77** (2008) 104402.
- M.S. Reis *et al.*, Specific Heat of Clustered low Dimensional Magnetic Systems, *Journal of Physics: Condensate Matter* **19** (2007) 446203.
- Ivan S. Oliveira *et al.*, Emaranhamento: Um Recurso Computacional que Desafia os Físicos, aceito no periódico *Ciência Hoje*.

2

Introdução ao emaranhamento

Neste capítulo discutiremos de maneira concisa um dos tópicos mais intrigantes e fascinantes da teoria quântica, o emaranhamento. A partir da definição matemática de emaranhamento, na seção 2.1, resumiremos alguns dos resultados mais relevantes referentes à sua caracterização, onde temas como critérios de separabilidade, detecção, quantificação e classificação de estados emaranhados serão abordados. A partir da seção 2.6, discutiremos o tema "Desigualdades de Bell", e suas controvérsias, que estabelecem uma interessante conexão entre física fundamental e a informação quântica (ver capítulo 3). Grande parte deste capítulo é baseada nos trabalhos [2,11–19], onde informações mais detalhadas sobre o emaranhamento podem ser encontradas.

2.1 Definição matemática de emaranhamento

Considere um sistema quântico composto pelos subsistemas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, cujos espaços de Hilbert associados são $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$. Um estado puro $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$, é dito separável se puder ser expresso como:

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle, \tag{2.1}$$

onde $|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$. Caso contrário o estado é dito emaranhado. Um exemplo de estado separável é o estado $|\psi\rangle = |00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$. Exemplos de estados emaranhados

são os chamados estados de Bell[1]:

$$|\phi^{\pm}\rangle = \frac{(|00\rangle \pm |11\rangle)}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \tag{2.2}$$

$$|\psi^{\pm}\rangle = \frac{(|01\rangle \pm |10\rangle)}{\sqrt{2}}. \tag{2.3}$$

Uma propriedade notável que podemos identificar a partir dos estados acima, é que o estado de cada subsistema é indefinido. No entanto, o estado do sistema todo é bem definido, ou seja, conhecido. Portanto, não há sentido em falar no estado individual de cada constituinte. Fato que contrasta claramente com a mecânica clássica, onde sempre podemos considerar estados individuais, de cada parte do sistema, em qualquer situação.

Em sistemas compostos por N subsistemas, uma generalização da definição discutida acima pode ser feita. Entretanto, em sistemas com vários constituintes existem diferentes graus de separabilidade, e torna-se necessário distingui-los. 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:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_k\rangle. \tag{2.4}$$

Se $k = N$ o estado é dito completamente separável, já que não há emaranhamento entre qualquer um 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 à seguinte definição. Um estado k-separável é dito fabricável por emaranhamento m-partido, ou simplesmente m-fabricável, se os estados $|\psi_i\rangle$ em (2.4) contiverem no máximo m partículas emaranhadas.

Partindo da definição de emaranhamento para estados puros, podemos estender o conceito de emaranhamento para misturas estatísticas. Assim, uma matriz densidade ρ é dita k-separável se puder ser escrita como uma mistura de estados k-separáveis:

$$\rho = \sum_i p_i \rho_{1,i} \otimes \rho_{2,i} \otimes \cdots \otimes \rho_{k,i}. \tag{2.5}$$

[1]Nesta tese usaremos a notação em que os estados de um sistema de dois níveis (um q-bit) são denotados por $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

Analogamente, se $\rho_{n,i}$ requerer uma mistura de estados m-fabricáveis para ser formado, a matriz ρ é chamada m-fabricável.

2.2 Critérios de separabilidade

Uma vez tendo definido o que são estados emaranhados, podemos tentar estabelecer critérios com os quais podemos identificar quando um estado é separável. Um critério geral de separabilidade não é conhecido, sendo os estados bipartidos, os mais estudados. A abordagem padrão para se determinar se um estado genérico bipartido ρ é emaranhado, ou não, leva em conta a teoria de mapas positivos. Um mapa positivo é uma transformação $\Lambda(\rho)$ feita sobre a matriz densidade, tal que:

$$\Lambda(\rho) \geq 0 \quad \forall \quad \rho \geq 0, \tag{2.6}$$

onde a notação $\rho \geq 0$ quer dizer que a matriz ρ é positiva semi-definida, ou seja, ρ não possui autovalores negativos. Uma propriedade importante sobre mapas positivos é que sua extensão $(\mathbb{1} \otimes \Lambda)$ não é necessariamente positiva [16]. Esta propriedade pode ser usada como critério de separabilidade. Por exemplo, considere uma matriz densidade ρ separável. A aplicação de um mapa positivo sobre apenas um dos subsistemas resulta em:

$$(\mathbb{1} \otimes \Lambda)(\rho) = \sum_i p_i \rho_{1,i} \otimes \Lambda(\rho_{2,i}). \tag{2.7}$$

Como $\Lambda(\rho_{2,i}) \geq 0$, o lado direito da equação (2.7) é positivo, o que implica em $(\mathbb{1} \otimes \Lambda)(\rho) \geq 0$. No entanto, quando há emaranhamento $(\mathbb{1} \otimes \Lambda)(\rho) < 0$, pois apenas estados separáveis possuem extensão positiva [16]. Assim, sempre que se puder demonstrar que a extensão de um mapa não é positiva para um dado estado quântico, podemos inferir que este estado é emaranhado. Entretanto, é importante ressaltar que o mero fato da extensão ser positiva não implica necessariamente em separabilidade. Para determinar se um estado é realmente separável, é necessário demonstrar que as extensões de todos os possíveis mapas são positivas.

Um importante mapa positivo que pode identificar uma grande classe de estados emaranhados é a transposição $\mathcal{T}$, sendo a sua extensão $(\mathbb{1} \otimes \mathcal{T})$ a transposição parcial $\mathcal{PT}$. Enquanto a transposição troca os índices das linhas da matriz densidade pelos índices das colunas, levando os elementos de matrizes $\langle i,k|\rho|j,l\rangle$ para $\langle j,l|\rho|i,k\rangle$, a tranposição

parcial troca apenas um dos índices, $\langle i,k|\rho|j,l\rangle$ se torna $\langle i,l|\rho|j,k\rangle$. De modo geral temos:

$$\mathcal{PT}(\rho) = \mathcal{PT}\left(\sum_{i,k,j,l} p_{ik,jl}|i,k\rangle\langle j,l|\right) = \sum_{i,k,j,l} p_{ik,jl}|i,l\rangle\langle j,k|. \tag{2.8}$$

Podemos sempre inferir que o estado ρ é emaranhado se $\mathcal{PT}(\rho) < 0$, sendo a condição $\mathcal{PT}(\rho) \geq 0$ insuficiente para determinar a separabilidade. Apenas no caso de sistemas cujos espaços de Hilbert possuem dimensão $2\otimes 2$ e $2\otimes 3$, $\mathcal{PT}(\rho) \geq 0$ é condição necessária e suficiente [20]. Este critério de separabilidade é conhecido na literatura como critério de Peres, e/ou Peres-Horodecki, ou ainda critério $\mathcal{PPT}$.

Além da abordagem feita através dos mapas positivos, existem muitas outras maneiras de abordar o problema e muitos outros critérios de separabilidade têm sido propostos na literatura [12]. Dentre as várias propostas, vale a pena mencionar uma recente proposta que estabelece um critério necessário e suficiente de separabilidade para sistemas tripartidos de dimensão $2 \otimes 2 \otimes 2$ [21]. Para estados puros, este critério estabelece que um estado $|\psi\rangle$ de três q-bits é completamente separável se

$$\sqrt{\sum_{\alpha}(\langle\psi^*|s^\alpha|\psi\rangle)^2} = 0, \tag{2.9}$$

onde $s^1 = -\sigma^y \otimes \sigma^y \otimes I_1$, $s^2 = -\sigma^y \otimes \sigma^y \otimes I_2$, $s^3 = -\sigma^y \otimes I_1 \otimes \sigma^y$, $s^4 = -\sigma^y \otimes I_2 \otimes \sigma^y$, $s^5 = -I_1 \otimes \sigma^y \otimes \sigma^y$, $s^6 = -I_2 \otimes \sigma^y \otimes \sigma^y$, $s^7 = -Iv \otimes \sigma^y \otimes \sigma^y$, $s^8 = -\sigma^y \otimes Iv \otimes \sigma^y$, $s^9 = -\sigma^y \otimes \sigma^y \otimes Iv$, com

$$\sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, I_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, I_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ e } Iv = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

A generalização deste critério para estados mistos pode ser encontrada em Yu *et al.* [21].

2.3 Quantificação do emaranhamento de pares

Um dos resultados mais impactantes no campo da computação e informação quântica foi a descoberta de que o emaranhamento é um recurso físico com o qual podemos realizar tarefas de processamento e transmissão de informação. Para isto, é necessário quantificar o emaranhamento, assim como acontece com qualquer outro recurso físico. Nesta seção iremos resumir algumas quantidades usadas na quantificação do emaranhamento de pares,

onde os pares não são necessariamente q-bits, podendo ser sistemas de dimensão arbitrária $\mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_2$.

2.3.1 Estados puros

Como mencionado na seção 2.1, em um estado completamente emaranhado não podemos atribuir um estado definido a qualquer um dos seus constituintes. Esta propriedade é expressa matematicamente no fato da matriz densidade reduzida de cada componente ser mista, mesmo quando o estado global é puro. Desta forma, é natural pensar que a quantificação da falta de informação sobre cada componente de um par emaranhado possa ser uma boa medida do emaranhamento do par. Para quantificar a ignorância sobre um estado ρ, pode-se usar a entropia de Von Neumann, definida por:

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log_2 \rho). \tag{2.10}$$

Para estados puros $S(\rho) = 0$, situação em que o estado é bem definido (a informação é completa) e para misturas estatísticas $S(\rho) \neq 0$. Do ponto de vista operacional, a entropia é melhor definida como:

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i, \tag{2.11}$$

onde λ_i são os autovalores[2] de ρ. O uso da entropia de Von Neumann para quantificar emaranhamento foi introduzida por Bennett *et al.* [22]. Basicamente a quantificação do emaranhamento é feita calculando a entropia da matriz densidade reduzida de qualquer um dos componentes envolvidos. A esta quantidade daremos o nome de entropia de emaranhamento $SE(\rho)$. Para estados separáveis $SE(\rho) = 0$ e para estados emaranhados $0 < SE(\rho) \leq \log_2 \mathcal{D}$, onde $\mathcal{D}$ é a dimensão do subsistema. Se $SE(\rho) = \log_2 \mathcal{D}$, o estado é caracterizado como sendo maximamente emaranhado.

2.3.2 Estados mistos

Para estados puros a entropia de emaranhamento é considerada uma boa medida do emaranhamento. Entretanto, para estados mistos $SE(\rho)$ não pode mais ser utilizada para

[2]No caso de autovalores nulos adotamos $0 \log_2 0 = 0$, resultado que pode ser derivado a partir do limite $\lim_{x \to 0} x \log_2 x$.

quantificar emaranhamento, pois cada subsistema pode ter entropia nula mesmo quando o estado global do sistema é emaranhado. Para estados mistos não existe uma única proposta para quantificar o emaranhamento. Entretanto uma boa medida de emaranhamento $E(\rho)$ deve satisfazer alguns requisitos [12]:

- Se ρ for separável, então $E(\rho) = 0$.
- O grau de emaranhamento de ρ não pode aumentar devido a operações locais e comunicações clássicas (OLCC), isto é:

$$E(\Lambda_{OLCC}(\rho)) \leq E(\rho). \tag{2.12}$$

- *Normalização*: O emaranhamento de um estado puro maximanente emaranhado ρ de dimensão $\mathcal{D} \otimes \mathcal{D}$ deve ser dado por:

$$E(\rho) = \log_2 \mathcal{D}. \tag{2.13}$$

- *Continuidade*: No limite em que a distância entre dois estados tende a zero, a diferença entre seus emaranhamentos deve tender a zero, ou seja,

$$E(\rho) - E(\sigma) \to 0 \tag{2.14}$$

  para $||\rho - \sigma||_2 \to 0$, onde $||A||_2 = \sqrt{A^\dagger A}$.

- *Aditividade*: O emaranhamento de n cópias idênticas de ρ deve ser igual a n vezes o emaranhamento de uma cópia, ou seja:

$$E(\rho^{\otimes n}) = nE(\rho). \tag{2.15}$$

- *Subaditividade*: O emaranhamento do produto tensorial de dois estados não deve ser maior que a soma do emaranhamento de cada estado, isto é:

$$E(\rho \otimes \sigma) \leq E(\rho) + E(\sigma). \tag{2.16}$$

- *Convexidade*: O emaranhamento deve ser uma função convexa, ou seja:

$$E(\lambda\rho + (1-\lambda)\sigma) \leq \lambda E(\rho) + (1-\lambda)E(\sigma) \tag{2.17}$$

  para $0 < \lambda < 1$.

O conjunto de requisitos realmente necessários para quantificar o emaranhamento é uma questão em aberto [12, 15]. Na verdade, algumas das propostas existentes na literatura não satisfazem alguns dos requisitos listados. A seguir resumiremos algumas das medidas de emaranhamento mais utilizadas para estados mistos:

Emaranhamento da Formação $EF(\rho)$ [23]: A idéia por trás do conceito de emaranhamento da formação consiste em pensar que o emaranhamento de estados mistos é na verdade uma média do emaranhamento da mistura de estados puros. O problema com este método de quantificar emaranhamento é que uma mistura estatística pode ter muitas decomposições diferente. Por exemplo: a mistura estatística

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}, \tag{2.18}$$

pode ser gerada por misturas uniformes de estados da base computacional e por misturas uniformes de estados de Bell. Ambas decomposições levam a matriz (2.18), porém a média da entropia em cada uma delas é diferente. Dentre todas as decomposições possíveis, devemos tomar aquela cuja a média é mínima, assim definimos $EF(\rho)$ como:

$$EF(\rho) = \min \sum_i p_i SE(\rho_i). \tag{2.19}$$

Para sistemas $2 \otimes 2$, o emaranhamento da formação possui uma forma analítica dada por [24]:

$$EF = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x), \tag{2.20}$$

onde $x = (1 + \sqrt{1 - C^2})/2$, sendo a função C denominada concurrência [3] e definida como $\max(0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4})$, onde Λ's são os autovalores de $R = \rho\sigma^y \otimes \sigma^y \rho^* \sigma^y \otimes \sigma^y$, rotulados em ordem decrescente. Como a concurrência é uma função monótona do emaranhamento da formação, ela própria é muitas vezes tomada como uma medida do emaranhamento.

Além de sistemas compostos por pares de q-bits, existem outros sistemas bipartidos altamente simétricos em que podemos obter formas analíticas para o emaranhamento da formação [13, 17, 25, 26]. Um exemplo são os estados de Werner [13, 27]. Estes estados são

[3] Do inglês *Concurrence*

definidos como estados ρ_W, de dimensão $\mathcal{D}\otimes\mathcal{D}$, invariantes sobre transformações $U\otimes U$, ou seja, são estados que satisfazem a condição $\rho_W = (U\otimes U)\rho_W(U\otimes U)^\dagger$ para qualquer operação unitária U. Podemos escrever um estado de Werner como [13]:

$$\rho_W = p\frac{2}{\mathcal{D}^2-\mathcal{D}}P_- + (1-p)\frac{2}{\mathcal{D}^2+\mathcal{D}}P_+, \tag{2.21}$$

onde $0\leq p\leq 1$ e $P_\pm = (\mathbb{1}\pm\sum_{ij}|i,j\rangle\langle j,i|)/2$. Neste caso foi demonstrado [13, 25] que o emaranhamento da formação é dado pela equação (2.20) com $x = 1/2-\sqrt{p(1-p)}$. Nos casos em que não é possível encontrar uma solução analítica, o cálculo do emaranhamento da formação deve envolver algum método de otimização numérica [28–32].

Negatividade $\mathcal{N}(\rho)$ [33]: A negatividade pode ser interpretada como uma quantificação do critério de Peres. Definimos $\mathcal{N}(\rho)$ como:

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{||\mathcal{PT}(\rho)||-1}{2}. \tag{2.22}$$

Esta quantidade é igual à soma dos autovalores negativos da transposta parcial de ρ. A principal vantagem da negatividade é o fato de ser facilmente computada para qualquer sistema $\mathcal{D}\otimes\mathcal{D}$. Entretanto, como o critério de Peres só é condição necessária e suficiente para separabilidade em alguns casos, a negatividade não é capaz de distinguir entre estados separáveis e estados emaranhados com transposta parcial positiva, os chamados estados de fronteira (do inglês *Bound States*).

Entropia Relativa de Emaranhamento $E_R(\rho)$ [34]: Esta quantidade pertence a uma classe mais ampla de medidas de emaranhamento conhecida como medidas baseadas em distância entre estados [35]. Neste caso, a quantificação do emaranhamento é dada pela menor distância $D(\rho||\sigma)$ entre o estado emaranhado ρ em questão e o estado separável σ mais próximo (ver figura (2.1)). No trabalho de Vedral e Plenio [34], duas medidas de distância entre matrizes foram apontadas como sendo úteis para quantificar o emaranhamento: a entropia relativa $S(\rho||\sigma) = tr(\rho\ln\rho-\rho\ln\sigma)$ e a métrica de Bures $D_B(\rho||\sigma) = 2-2\sqrt{F(\rho,\sigma)}$, onde $F(\rho,\sigma) = [Tr(\sqrt{\sigma^{1/2}\rho\sigma^{1/2}})]^2$. Quando $S(\rho||\sigma)$ é utilizada, a medida é chamada de entropia relativa de emaranhamento. Da mesma forma como ocorre com o emaranhamento da formação, o cálculo da $E_R(\rho)$ envolve métodos numéricos [34, 36].

Emaranhamento Destilável $E_D(\rho)$ [23]: Esta quantidade nos diz o quanto de emaranhamento podemos extrair de um determinado estado. Para definir emaranhamento

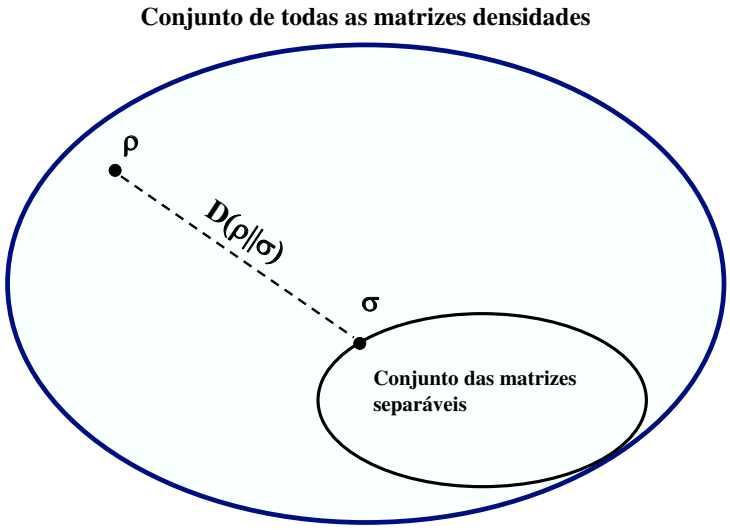


Figura 2.1: Visão esquemática de uma medida de emaranhamento baseada na distância entre estados.

destilável, considere um protocolo de destilação[4], que transforma o estado $\rho^{\otimes n}$ em um estado σ contendo m cópias de estados de Bell $|\phi^+\rangle$. O emaranhamento destilável $E_D(\rho)$ é definido como sendo o máximo da razão m/n, no limite em que n tende para o infinito:

$$E_D(\rho) = \max\left[\lim_{n\to\infty}\frac{m}{n}\right], \tag{2.23}$$

onde a maximização é feita sobre todos os protocolos possíveis de destilação.

Custo de Emaranhamento $E_C(\rho)$ [37]: O custo de emaranhamento é definido de maneira dual ao emaranhamento destilável, esta quantidade quantifica o grau de emaranhamento necessário para criar um determinado estado. Para definir o custo de emaranhamento, considere um protocolo de diluição[5], que transforma o estado σ contendo m cópias de estados de Bell $|\phi^+\rangle$ em um determinado estado $\rho^{\otimes n}$. O custo de emaranhamento $E_C(\rho)$ é definido como sendo o mínimo da razão m/n, no limite em que n tende para o infinito:

$$E_C(\rho) = \min\left[\lim_{n\to\infty}\frac{m}{n}\right], \tag{2.24}$$

onde a minimização é feita sobre todos os protocolos possíveis de diluição.

[4]Um protocolo de destilação é um processo no qual n cópias de um estado genérico ρ são transformados em m cópias de estados de Bell $|\phi^+\rangle$ usando apenas operações locais e comunicações clássicas.

[5]Um protocolo de diluição é o inverso de um protocolo destilação. Neste caso m cópias de estados de Bell $|\phi^+\rangle$ são transformados em n cópias de um estado genérico ρ usando apenas operações locais e comunicações clássicas.

2.4 Quantificação do emaranhamento de sistemas multipartidos

Em sistemas multipartidos, a quantificação do emaranhamento se torna mais complicada. A dificuldade está no fato de existirem maneiras diferentes de emaranhar N sistemas com $N > 2$. Considere por exemplo o estado de Greenberg-Horne-Zeilinger (GHZ)

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle) \tag{2.25}$$

e o estado W

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle). \tag{2.26}$$

Estes são dois estados emaranhados de três q-bits. Eles são considerados inequivalentes [38], pois não é possível transformar um estado no outro por meios de operações locais e comunicações clássicas. Ambos estados definem duas classes fundamentalmente diferentes de estados emaranhados. Nenhum estado que pertença a uma das classes pode ser transformado em um estado da outra classe através de OLCC. Este fato deixa a definição de boa parte das medidas de emaranhamento ambígua. Por exemplo: No caso bipartido, o emaranhamento destilável está associado ao maior número de um estado de referência $|\phi^+\rangle$ que podemos obter a partir de um estado genérico usando protocolos de destilação. Porém em sistemas multipartidos não existe uma única referência. Portanto como definir $E_D(\rho)$? Uma maneira de contornar o problema é definir especificamente a referência. Assim teríamos um emaranhamento destilável definido em relação ao GHZ, outro em relação ao estado W ou em relação a qualquer estado de referência de interesse. Por isso, alguns autores defendem que não basta apenas perguntar qual é o grau de emaranhamento de um estado multipartido, também é preciso classificar o tipo de emaranhamento.

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 [11, 12, 15, 16].

2.5 Testemunhas de emaranhamento

Devido à grande dificuldade para computar quantidades que quantificam o emaranhamento e definir critérios de separabilidade em casos mais gerais, outros métodos de identificação de estados emaranhados se fazem necessários. Usualmente a detecção de emaranhamento é feita através de uma testemunha de emaranhamento, que abreviaremos como EW, do inglês "Entanglement Witness". O conceito foi introduzido por Horodecki *et el.* [20] e posteriormente estudado em mais detalhes por Terhal [39]. Por definição, uma testemunha de emaranhamento é um operador Hermitiano que possui valor esperado positivo ($Tr(EW\rho) \geq 0$) para todos os estados separáveis e negativo para alguns estados emaranhados.

Para entender como este método funciona, vamos considerar a simples visão geométrica ilustrada na figura (2.2). Seja $\mathcal{D}$ o conjunto de todas as matrizes densidades, $\mathcal{E}$ e $\mathcal{S}$ o conjunto de todas as matrizes emaranhadas e separáveis, respectivamente. O ponto crucial que permite a existência das testemunhas de emaranhamento é o fato de $\mathcal{S}$ ser um conjunto convexo [12]. Sendo assim, dado um ponto qualquer fora de $\mathcal{S}$, é sempre possível encontrar um plano que separa o ponto do conjunto $\mathcal{S}$ [12]. A testemunha de emaranhamento define este plano, separando um dado subconjunto de estados emaranhados do conjunto de estados separáveis. Quanto mais próximo o plano definido por EW estiver do conjunto $\mathcal{S}$, mais otimizada é a testemunha e mais estados emaranhados ela poderá detectar. Na situação ideal, o plano definido por EW tangencia $\mathcal{S}$. Para revelar mais estados emaranhados também podemos usar várias testemunhas em conjunto. Entretanto, para se caracterizar completamente $\mathcal{S}$, em princípio, seriam necessárias infinitas testemunhas de emaranhamento, a menos que $\mathcal{S}$ tenha a forma de um politopo.

2.6 Desigualdades de Bell

Em 15 de maio de 1935, Albert Einstein, Natan Rose e Boris Podolsky (EPR) publicaram um trabalho [1] que se tornou um dos mais comentados e influentes na física. Neste artigo, os autores defendem que a mecânica quântica é uma teoria incompleta. A idéia fundamental que está por trás do artigo de EPR é o conceito de realismo local, ou seja, a hipótese de que objetos físicos possuem propriedades definidas que independem do processo de observação, e de que uma medida feita por um observador não pode influ-

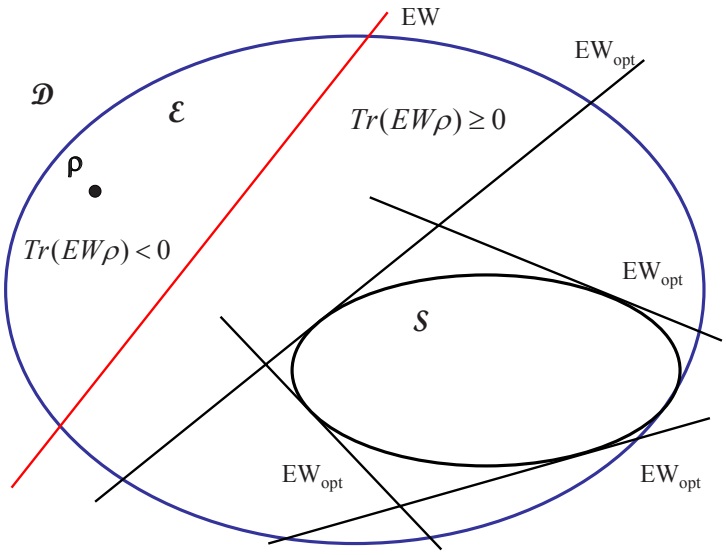


Figura 2.2: Visão esquemática das testemunhas de emaranhamento, mostrando a diferença entre uma testemunha otimizada EW_{opt} e outra não otimizada EW.

enciar medidas feitas por outro observador, se eles estiverem separados de tal forma que a troca de informações entre eles seja impossível.

Desta maneira, o chamado paradoxo EPR é um paradoxo no seguinte sentido: se condições aparentemente razoáveis, tais como localidade e realismo, forem introduzidas na mecânica quântica, obtemos uma contradição. Porém, a mecânica quântica por si só não apresenta nenhuma inconsistência interna e é extraordinariamente consistente com experimentos que vão desde a física da matéria condensada até a física de partículas elementares.

Um tentativa de contornar esta situação consiste em postular a existência de um conjunto de variáveis, que não fazem parte do formalismo da mecânica quântica, chamadas "variáveis ocultas" [2]. Um modelo de variáveis ocultas supostamente é capaz de reproduzir todas as previsões da mecânica quântica sem apresentar contradição com o realismo local.

Entretanto, em 1965 John Bell [3] descobriu uma incompatibilidade entre a mecânica quântica e a teoria de variáveis ocultas. Matematicamente, esta incompatibilidade tomou a forma de um conjunto de desigualdades, hoje conhecidas como desigualdades de Bell, que podem ser violadas apenas por sistemas emaranhados. Qualquer estado puro emaranhado exibe alguma inconsistência com o realismo local [40,41], ou seja, sempre é possível

encontrar algum tipo de desigualdade de Bell na qual um estado puro emaranhado viole. No entanto, para estados mistos emaranhados não se sabe se a mesma afirmação pode ser feita.

Recentemente o interesse por desigualdades de Bell tem aumentado devido a sua conexão com a eficiência de protocolos de comunicação quânticos e a segurança de sistemas de criptografia quântica (ver capítulo 3). Além disso, desigualdades de Bell podem ser interpretadas como uma testemunha de emaranhamento [39]. Neste capítulo faremos uma breve revisão sobre as desigualdades de Bell. Na seção 2.6.1 mostraremos como a hipótese do realismo local é usada para derivar a desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt [8], que é a forma de desigualdade de Bell mais estuda e testada experimentalmente. Na seção 2.6.2 resumiremos alguns testes experimentais reportados na literatura e discutiremos suas implicações. Por fim, mostraremos generalizações das desigualdades de Bell em 2.6.3 e apresentaremos a desigualdade temporal de Bell em 2.6.4. Para revisões mais completas recomendamos [2, 18, 19].

2.6.1 Clauser, Horne, Shimony e Holt

Para derivar a desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt vamos considerar um *ensemble* de dois q-bits[6] preparados em um determinado estado $|\psi\rangle$. Os q-bits são enviados para dois observadores distintos, Alice e Bob. Ou seja, um q-bit vai para Alice e outro para Bob. Sendo que Alice (Bob) pode escolher medir o observável A_1 (B_1) ou o observável A_2 (B_2), que possuem apenas dois resultados possíveis ± 1. Assim que Alice recebe o seu q-bit, ela escolhe aleatoriamente entre A_1 e A_2, faz a medida e anota o resultado. Bob faz o mesmo de forma independente de Alice. Após muitas rodadas de experimentos, Alice e Bob se encontram para comparar as correlações entre seus resultados.

Segundo a hipótese do realismo, o resultado de cada medida é totalmente determinado por um conjunto de variáveis λ. Sendo assim, podemos escrever a função de correlação entre os observáveis medidos por Alice e Bob como:

$$E(i,j) = \int f(\lambda, a, b) a(\lambda, i, j) b(\lambda, i, j) d\lambda, \tag{2.27}$$

[6] É importante enfatizar que a desigualdade de CHSH pode ser definida também para *ensembles* de partículas que não são q-bits. Porém, nesta tese, a desigualdade de CHSH será apenas estudada no contexto dos q-bits.

onde $f(\lambda, a, b)$ é a distribuição de probabilidade do sistema estar em um estado onde $a(\lambda, i, j)$ é o resultado da medida de A_i e $b(\lambda, i, j)$ é o resultado da medida de B_j. Agora vamos definir a quantidade $CHSH$ como sendo:

$$\begin{aligned} CHSH &= E(1,1) + E(2,1) + E(1,2) - E(2,2) \\ &= \int f(\lambda,a,b)a(\lambda,1)b(\lambda,1)d\lambda + \int f(\lambda,a,b)a(\lambda,2)b(\lambda,1)d\lambda \\ &+ \int f(\lambda,a,b)a(\lambda,1)b(\lambda,2)d\lambda - \int f(\lambda,a,b)a(\lambda,2)b(\lambda,2)d\lambda. \end{aligned} \tag{2.28}$$

Segundo hipótese da localidade, uma medida feita por um observador não pode depender da medida feita por outro observado remotamente separado, logo $a(\lambda, i, j) = a(\lambda, i)$ e $b(\lambda, i, j) = b(\lambda, j)$. Desta maneira, temos que:

$$\begin{aligned} a(\lambda,1)b(\lambda,1) + a(\lambda,1)b(\lambda,2) + a(\lambda,2)b(\lambda,1) - a(\lambda,2)b(\lambda,2) &= \\ a(\lambda,1)[b(\lambda,1) + b(\lambda,2)] + a(\lambda,2)[b(\lambda,1) - b(\lambda,2)]. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Como os resultados das medidas só podem ser ± 1, pode-se mostrar que $a(\lambda,1)[b(\lambda,1)+b(\lambda,2)] = 0$ ou $a(\lambda,2)[b(\lambda,1)-b(\lambda,2)] = 0$. Em ambos os casos $a(\lambda,1)b(\lambda,1)+a(\lambda,1)b(\lambda,2)+a(\lambda,2)b(\lambda,1) - a(\lambda,2)b(\lambda,2) = \pm 2$, logo:

$$-2 \leq \int f(\lambda,a,b)[a(\lambda,1)b(\lambda,1) + a(\lambda,2)b(\lambda,1) + a(\lambda,1)b(\lambda,2) - a(\lambda,2)b(\lambda,2)]d\lambda \leq +2. \tag{2.30}$$

Comparando (2.30) com (2.28), temos que:

$$-2 \leq CHSH \leq +2. \tag{2.31}$$

Esta é a desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt, inicialmente demonstrada em [8] e obedecida por qualquer modelo que leva em consideração a hipótese do realismo e da localidade. Porém os limites impostos pela mecânica quântica para a mesma quantidade $CHSH$ são $\pm 2\sqrt{2}$ (limites de Tsirelson [42]). Desta forma, há situações em que a mecânica quântica viola a desigualdade (2.31), situações estas que não são compatíveis com o realismo local. Estados puros emaranhados de dois q-bits sempre violam CHSH [43], porém existem estados mistos com um certo grau de emaranhamento que não violam a desigualdade de CHSH [27]. A condição necessária e suficiente para a violação

da desigualdade de CHSH por um estado qualquer de dois q-bits é dada em [44] e a condição para violação máxima pode ser encontrada em [45]. Por fim, é importante dizer que a desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt é equivalente a qualquer outra desigualdade de Bell para dois q-bits com dois observáveis dicotômicos por observador (teorema de Fine [2, 46]), onde a palavra equivalência é usada no sentido de que estados que violem qualquer uma das outras desigualdades de Bell também violarão a de CHSH.

2.6.2 Testes experimentais

Desde a década de 70, a violação da desigualdade de CHSH tem sido verificada em diversos experimentos envolvendo fótons (para uma revisão de vários experimentos com fótons ver [9]), prótons de baixa energia [47], íons de $^{9}Be^{+}$ e $^{1}71Yb^{+}$ confinados em cavidades [48, 49], hádrons produzidos em reações nucleares [50], um sistema híbrido compreendido por um átomo e um fóton [51] e nêutrons individuais [52], cujo emaranhamento é entre o grau de liberdade espacial e de spin. Também é importante mencionar um interessante experimento [53], realizado em 2007, que relatou a violação da desigualdade de CHSH entre a Ilha de la Palma e a Ilha Tenerife, separadas por 144 Km, usando fótons que se propagavam pelo ar. Além de Clauser, Horne, Shimony e Holt, outras desigualdades de Bell também têm sido testadas. Por exemplo: a violação da desigualdade de Mermin, Ardehali, Belinskii e Klyshko (MABK) [18, 54–56], uma generalização de CHSH para N q-bits, foi verificada em sistemas contendo três [57] e quatro [58] fótons emaranhados.

Todos os experimentos já realizados até hoje reportaram a violação das desigualdades de Bell. Para muitos, esses experimentos indicam claramente que as idéias contidas no realismo local devem ser abandonadas. Entretanto ainda há controvérsias. Basicamente existem dois problemas experimentais conhecidos como a fuga da localidade ou do cone de luz e a fuga da detecção que são responsáveis por estas controvérsias.

A fuga do cone de luz acontece quando o intervalo de tempo entre a detecção de cada partícula permite que um sinal luminoso viaje entre os dois detectores. A fuga da detecção ocorre quando e eficiência de detecção das partículas emaranhadas é baixa. Imperfeições no aparato experimental sempre levam ao fato de que apenas um pequeno subconjunto do total de partículas emaranhadas é detectado. A questão é se realmente os eventos observados representam fielmente todo o *ensemble*. Em princípio, o subconjunto detectado poderia conter uma distribuição de variáveis ocultas diferentes do conjunto total. Assim

seria possível que o subconjunto de eventos detectados viole alguma desigualdade de Bell mesmo que o conjunto total de eventos não viole. Neste caso, poderia se dizer que o subconjunto simularia a violação da desigualdade de Bell. Este problema foi discutido pela primeira vez por Pearle [59] em 1970. Considerando a eficiência de detecção, η, a desigualdade de CHSH é dada por [60]:

$$-\left(\frac{4}{\eta}-2\right) \leq CHSH \leq +\left(\frac{4}{\eta}-2\right) \tag{2.32}$$

Portanto, um estado que viole (2.31) maximamente, violará (2.32) apenas se $\eta \geq 2(\sqrt{2}-1) \sim 82\%$. O famoso experimento de Alain Aspect e colaboradores [61] na década de 80, posteriormente repetido, em melhores condições de medida pelo grupo de Insbruck [62] em 1998, superou o problema da fuga do cone de luz mas não a fuga da detecção. Recentemente experimentos com íons [48, 49] alcançaram a eficiência de detecção de $\sim 100\%$, mas como a separação entre os íons eram de poucos centímetros, a fuga do cone de luz não foi superada. Até hoje, nenhum experimento ideal, que satisfaça ambas as condições, foi realizado. Este fato faz com que alguns físicos ainda argumentem em favor das variáveis ocultas e da hipótese do realismo local.

Além dos experimentos já citados, é importante também mencionar um recente teste de uma desigualdade de Bell com fótons emaranhados reportado por Gröblacher *et al.* [63]. O que este teste tem de diferente dos outros testes já realizados, é o fato que este não testa teorias "locais", mas sim teorias "não-locais". Neste tipo de teoria apenas a hipótese do realismo é feita, sendo permitido qualquer tipo de interação não-local entre as partes envolvidas. A desigualdade testada é dada por [63]:

$$S_{NLHV}(\phi) = |E_{11}(\phi) + E_{23}(0)| + |E_{22}(\phi) + E_{23}(0)| \leq 4 - \frac{4}{\pi}\left|\sin\frac{\phi}{2}\right|, \tag{2.33}$$

onde $E_{ij}(\phi)$ é a correlação entre medidas de polarização, feitas quando a polarização do fóton A é observada na direção $\vec{a_i}$ e do fóton B na direção $\vec{b_j}$, sendo ϕ o ângulo relativo entre $\vec{a_i}$ e $\vec{b_j}$. Escolhendo $\vec{a_1} = (1,0,0)$, $\vec{a_2} = (0,0,1)$, $\vec{b_1} = (cos(\phi), 0, -sin(\phi))$, $\vec{b_2} = (0, sin(\phi), cos(\phi))$ e $\vec{b_3} = (0,0,1)$, o estado de Bell $|\psi^-\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$ viola (2.33), com a violação máxima em $\phi = 18.8^0$ e $\phi = 341.2^0$. O resultado experimental obtido em [63] é mostrado na figura (2.3). Como podemos ver, a violação da desigualdade (2.33) é verificada entre aproximadamente $5^0 < \phi < 35^0$. Este resultado sugere que não apenas o conceito de localidade, mas também a idéia de que as propriedades dos objetos estão pré-determinadas, independentemente do processo de observação, devem

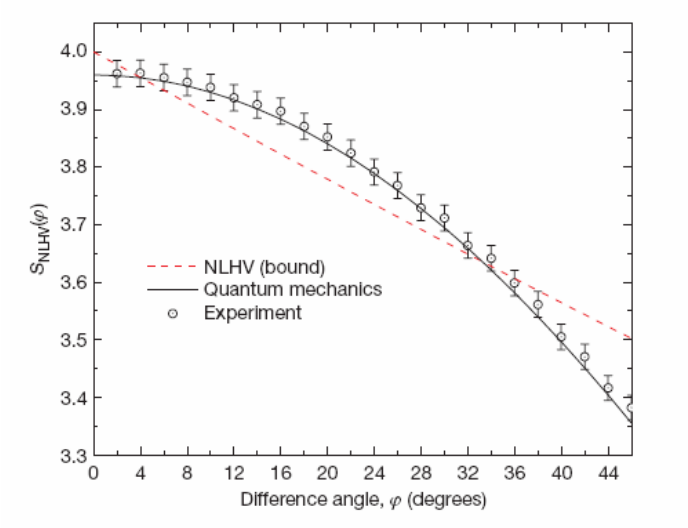


Figura 2.3: Teste experimental de teorias realísticas não-locais. Os pontos são dados experimentais, a linha tracejada é o limite imposto por teorias realísticas não-locais e a linha sólida é a previsão da mecânica quântica.

ser abandonados no contexto da mecânica quântica.

2.6.3 Desigualdades de Bell generalizadas

Com o avanço da ciência da informação quântica, novas aplicações para as desigualdades de Bell foram desenvolvidas. Recentemente foi demonstrado que toda desigualdade de Bell está relacionada a um problema de complexidade de comunicação específico. Com o uso de estados que violam tal desigualdade de Bell pode-se sempre construir um protocolo de comunicação quântico mais eficiente do que seu análogo clássico (ver seção 3.2.4). Por outro lado, no campo da criptografia quântica, violações de desigualdades de Bell podem ser utilizadas como um critério de segurança (ver seção 3.3). Estes resultados sugerem que desigualdades de Bell são uma importante ferramenta para a área de informação quântica. Portanto, é extremamente importante encontrar e classificar novas desigualdades de Bell, bem como os estados emaranhados que as violem.

Encontrar e classificar desigualdades de Bell, em casos gerais é um problema extremamente difícil e atualmente sem solução. A dificuldade está no fato de que à medida que o número de observadores ou o número de alternativas de medidas para cada observador cresce, o número de configurações experimentais que podem ser construídas também cresce rapidamente. Isto torna o problema computacional extremamente difícil. Além

disso, o tipo e o número de medidas que diferentes observadores podem fazer são em princípio ilimitados. Uma maneira de abordar o problema é considerar o espaço formado por todas as probabilidades[7] que podem ser construídas pelos diferentes observadores e tentar determinar a região deste espaço onde as probabilidades que podem ser reproduzidas por modelos de variáveis ocultas estão confinadas. O ponto fundamental nesta abordagem é o fato de que esta região é um conjunto convexo [18], ou seja, um politopo. Desta maneira, as inequações que definem as faces do politopo, que separam a região clássica da região quântica, podem ser pensadas como sendo as generalizações naturais das desigualdades de Bell. O número total de desigualdades possíveis é dado pelo número de faces do politopo. Desta maneira, encontrar todas as possíveis desigualdades de Bell consiste em resolver um problema que em matemática é conhecido como problema da casca convexa, que consiste em encontrar a menor região convexa que envolve um determinado número de pontos.

Computacionalmente, achar as desigualdades de Bell é um problema extremamente complicado. Do ponto de vista da teoria da computação, este é um problema de complexidade ***coNP*** [18,64] (ver seção 3.1.1). No entanto alguns resultados teóricos existem na literatura. Um exemplo é o caso de n observadores e duas variáveis dicotômicas para cada observador. Neste caso foi demonstrado que existem 2^{2^n} desigualdades de Bell [65, 66] e que todas estas desigualdades são equivalentes a uma única desigualdade dada por:

$$\sum_{s_1\cdots s_n=\pm 1}\left|\sum_{k_1\cdots k_n=1,2} s_1^{k_1-1}\cdots s_1^{k_n-1}E(k_1,\cdots,k_n)\right|\leq 2^n. \tag{2.34}$$

Novamente a palavra equivalência significa que estados que violem uma das 2^{2^n} desigualdades de Bell também violarão (2.34). A condição necessária e suficiente para que um estado genérico de N q-bits viole (2.34) pode ser encontrada em [66]. Outras situações mais complexas, envolvendo desigualdades com mais de dois observáveis por observador, também têm sido estudadas analiticamente [67,68]. O fato interessante sobre as desigualdade estudadas em [67,68] é que elas são mais fortes que (2.34). Por "mais forte"queremos dizer que as novas desigualdades estudadas em [67,68] podem ser violadas por estados que

[7]Quando temos dois observadores e dois observáveis dicotômicos para cada observador, caso em que a desigualdade de CHSH está inserida, Alice e Bob podem construir 4 diferentes funções de correlação. Cada função de correlação envolve 4 probabilidades diferentes: A probabilidade de ambos encontrarem +1 como resultado, Alice encontrar +1 e Bob -1, Alice encontrar -1 e Bob +1 e finalmente a probabilidade de ambos encontrarem -1. No total existem 16 = 4 x 4 probabilidades. No caso de n observadores, m observáveis por observador e v possibilidades de resultados para cada observável, teremos então $(mv)^n$ probabilidades, que definem um espaço de dimensão $(mv)^n$.

não violam (2.34). Um exemplo muito usado na literatura é o estado GHZ generalizado de N q-bits, dado por:

$$|GHZ\rangle = cos(\alpha)|0\cdots0\rangle + sin(\alpha)|1\cdots1\rangle, \tag{2.35}$$

onde $0 \leq \alpha \leq \pi/4$. Foi demonstrado em [69] que (2.35) nunca viola (2.34) para $sin(2\alpha) \leq 1/\sqrt{2^{N-1}}$ e N ímpar, no entanto foi encontrado que (2.35) pode violar as novas e mais complexas desigualdades derivadas em [67, 68].

2.6.4 Desigualdade temporal de Bell

A desigualdade temporal de Bell foi inicialmente introduzida em 1985 por Leggett e Garg [70] no contexto do estudo de efeitos quânticos em sistemas macroscópicos. A desigualdade foi originalmente proposta para confrontar a mecânica quântica com teorias baseadas no macrorealismo[8] e na hipótese de que é sempre possível determinar o estado de um sistema macroscópico com uma pertubação arbitrariamente pequena sobre o sistema.

Para derivar a desigualdade temporal, vamos considerar um sistema de dois níveis (um q-bit) e um observável X que possui apenas dois autovalores: ±1. As medidas do observável X em quatro instantes diferentes de tempo são denotadas por $X(t_1)$, $X(t_2)$, $X(t_3)$ e $X(t_4)$, onde $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$. Com estas quantidades, podemos construir funções de correlações "temporais", $E(t_i, t_j) = \langle X(t_i)X(t_j)\rangle$, análogas as funções de correlação definidas na seção 2.6.1. Com tais funções de correlação, definimos a quantidade:

$$B_t = E(t_1, t_3) + E(t_2, t_3) + E(t_1, t_4) - E(t_2, t_4). \tag{2.36}$$

A equação (2.36) é simplesmente a equação (2.28) com rótulos diferentes. Assim, evocando a hipótese do realismo e trocando a hipótese da localidade pela hipótese de que é possível determinar o estado de um sistema sem perturbá-lo, ou seja, a hipótese de que uma medida em t_i não pode influenciar o resultado de uma medida em t_j, temos:

$$-2 \leq B_t \leq +2, \tag{2.37}$$

para qualquer teoria "realística"e "não invasiva". Como vemos, esta desigualdade não faz nenhuma menção sobre a não-localidade e o emaranhamento. Esta desigualdade de

[8] Macrorealismo é a hipótese do realismo aplicada à objetos macroscópicos, ou seja, é a hipótese de que sistemas macroscópicos possuem propriedades definidas que independem do processo de observação.

Bell pode ser aplicada à um q-bit apenas, e por este ponto de vista é mais simples de ser testada em laboratório. A grande dificuldade de testar esta desigualdade é a necessidade de realizar medidas não invasivas. Propostas experimentais têm sido feitas [71–73], porém até hoje nenhum teste experimental da desigualdade temporal de Bell foi implementado.

3

Emaranhamento como um recurso computacional

Um dos resultados mais impactantes no campo da computação e informação quântica foi a descoberta de que o emaranhamento é um recurso físico com o qual podemos realizar tarefas de processamento e transmissão de informação. Além de resultar em importantes aplicações práticas, a relação entre emaranhamento e a ciência da computação estabelece uma interessante conexão entre dois campos que aparentemente são totalmente descorrelacionados: a computação e a física quântica.

Exemplos explícitos, e extremamente interessantes, onde a física fundamental encontra a ciência da computação são as conexões existentes entre as desigualdades de Bell e os protocolos de comunicação e criptografia quântica. Recentemente foi demonstrado que toda desigualdade de Bell está relacionada a um problema de complexidade de comunicação específico. Com o uso de estados que violam tal desigualdade de Bell pode-se sempre construir um protocolo de comunicação quântico mais eficiente do que seu análogo clássico. Por outro lado, no campo da criptografia quântica, violações de desigualdades de Bell podem ser utilizadas como um critério de segurança.

Esta visão de emaranhamento como um recurso computacional motivou o crescente interesse sobre o estudo de estados emaranhados, tanto do ponto de vista prático como do ponto de vista fundamental. Neste capítulo resumiremos de forma concisa algumas aplicações do emaranhamento. O capítulo contém os conceitos básicos de computação − clássica e quântica −, comunicação e criptografia quântica explorando a relação entre emaranhamento e o processamento e a transmissão de informação. As seções 3.1, 3.2 e 3.3 são dedicadas à computação quântica, à comunicação quântica e à criptografia

quântica, respectivamente. No final do capítulo, seção 3.4, descreveremos uma aplicação do emaranhamento à metrologia. Grande parte deste capítulo é baseada no livro de Nielsen e Chuang [35], no livro de Oliveira *et al.* [74] e nos artigos de revisão [75, 76].

3.1 Processamento de informação

Nesta seção alguns conceitos básicos sobre computação clássica são apresentados, seguidos de uma breve introdução à computação quântica e seus algoritmos. No final da seção discutiremos a relação entre emaranhamento e o processamento da informação quântica.

3.1.1 Computação clássica

Um computador clássico codifica a informação a ser processada em um código binário, sendo o bit (*Binary Digit*) a menor unidade de informação armazenável. Um bit pode assumir apenas dois valores possíveis 0 ou 1. Um conjunto de bits pode armazenar qualquer tipo de informação, como por exemplo números inteiros escritos na base 2. O processamento da informação é feito através da aplicação de portas lógicas. Estes são operadores que atuam sobre os bits, transformando um dado conjunto inicial de bits, na resolução, por exemplo, de um problema matemático.

Um conceito importante em ciência da computação é o de algoritmo. Um algoritmo é uma receita precisa, contendo as operações e a ordem de suas aplicações que são necessárias para se realizar uma determinada tarefa. Qualquer algoritmo pode ser realizado compondo um conjunto finito de portas lógicas, denominado de "conjunto universal". Um exemplo de portas universais para a computação clássica são as portas NOT, AND e OR. A porta NOT inverte o bit, ou seja, NOT transforma o bit 0 em 1 e o bit 1 no bit 0. As portas AND e OR são operações com dois bits de entrada e um bit de saída, suas ações sobre os bits são descritas nas tabelas (3.1) e (3.2).

Nos computadores atuais as idéias abstratas de bits e portas lógicas são implementadas por circuitos eletrônicos. Uma descrição detalhada de como portas lógicas podem ser construídas e integradas dentro dos processadores atuais pode ser encontrada no livro de Horowitz e Hill [77]. Com um conjunto universal de portas lógicas, um meio físico para implementá-las e também um algoritmo, temos, em princípio, todos os ingredientes

Bit de Entrada 1	Bit de Entrada 2	Bit de Saída
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Tabela 3.1: Tabela verdade da porta clássica AND.

Bit de Entrada 1	Bit de Entrada 2	Bit de Saída
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

Tabela 3.2: Tabela verdade da porta clássica OR.

básicos para resolver qualquer problema computacional. Uma questão fundamental para otimizar os custos no processo de computação, consiste em determinar quais são os recursos físicos mínimos necessários para realizar uma tarefa computacional. Neste cenário surge o conceito de complexidade computacional.

A complexidade computacional é um ramo da ciência da computação que procura encontrar quais são os recursos mínimos requeridos para se resolver uma determinada classe de problemas, mesmo que o algoritmo que resolva tais problemas não seja conhecido explicitamente. Há essencialmente três propriedades que podem ser levadas em consideração na definição de uma classe de complexidade: os recursos (tempo, espaço, energia, etc.), o tipo de problema computacional (problemas de otimização, problemas de busca, etc.) e o modelo computacional (computadores clássicos deterministas, computadores clássicos probabilistas, computadores quânticos, etc.). Um problema é considerado fácil, tratável ou solúvel se existir um algoritmo capaz de resolvê-lo usando apenas recursos polinomiais, ou seja, o número de operações lógicas cresce de modo polinomial com o número de bits necessários para resolver o problema. Um problema é considerado difícil, intratável ou não-solúvel se o melhor algoritmo existente capaz de resolvê-lo solicitar recursos exponenciais, ou seja, o número de operações lógicas cresce de modo exponencial com o número de bits necessário para resolver o problema.

Devido aos vários tipos de problemas, modelos e recursos físicos, o estudo da complexidade computacional é extremamente rico e complicado. Há uma grande abundância

de classes de complexidade [1]. Porém, na literatura de computação quântica geralmente apenas duas classes são abordadas, a chamada classe $\boldsymbol{P}$ e a classe $\boldsymbol{NP}$, ambas definidas no contexto dos problemas de decisão, ou seja, problemas cuja solução é "sim"ou "não". O problema de se encontrar os fatores primos de um número ou se encontrar um item em uma lista desordenada podem ser formulados como problemas de decisão.

A classe $\boldsymbol{P}$ é a de todos o problemas de decisão que podem ser resolvidos usando algoritmos cujo número de operações lógicas é uma função polinomial do número dos bits de entrada. A classe $\boldsymbol{NP}$ é aquela que contém todos os problemas de decisão cuja a verificação da solução possa ser feita em tempo polinomial. Fica claro que $\boldsymbol{P}$ é um subconjunto de $\boldsymbol{NP}$, pois a capacidade de resolver um problema implica na verificação de suas soluções. Porém, não é claro se existe algum problema em $\boldsymbol{NP}$ que não pertença a $\boldsymbol{P}$, ou seja, se $\boldsymbol{P = NP}$ ou se $\boldsymbol{P \neq NP}$. Este é o problema em aberto mais famoso da ciência da computação[2]. A maioria dos cientistas da computação acredita que $\boldsymbol{P \neq NP}$. Dentro da classe $\boldsymbol{NP}$ existe uma subclasse de problemas essencialmente importantes, a **NP-completa**, abreviada por $\boldsymbol{coNP}$. Os cientistas da computação mostraram que um algoritmo que resolva um problema da $\boldsymbol{coNP}$ pode ser adaptado para resolver qualquer outro problema de $\boldsymbol{NP}$. Desta maneira, se qualquer problema de $\boldsymbol{coNP}$ tiver uma solução polinomial então todos os problemas $\boldsymbol{NP}$ também terão, implicando em $\boldsymbol{P = NP}$. Agora se $\boldsymbol{P \neq NP}$, nenhum problema da $\boldsymbol{coNP}$ poderá ser resolvido eficientemente em um computador clássico.

Existem muitos problemas $\boldsymbol{NP}$, tal como a fatoração de números primos, cujo o melhor algoritmo conhecido para encontrar a solução requer recursos exponenciais. Porém até hoje ninguém foi capaz de provar que esses problemas não possam ter solução polinomial. A grande promessa da computação quântica, ainda sem prova matemática, é que computadores quânticos poderão resolver eficientemente estes problemas $\boldsymbol{NP}$, ou pelo menos alguns deles, que se acredita não possuírem solução polinomial em computadores clássicos. É uma grande questão em aberto se de fato a computação quântica pode oferecer um ganho exponencial de velocidade sobre os computadores clássicos e se o emaranhamento é o recurso computacional que estaria por trás desse ganho exponencial.

[1] Uma lista contendo uma breve descrição sobre 466 classes de complexidade clássicas e quânticas pode ser encontrada em http://qwiki.stanford.edu/wiki/Complexity_Zoo .

[2] Este problema foi eleito pelo o Clay Mathematics Institute (CMI) − ONG norte-americana que desenvolve e dissemina conhecimentos matemáticos − como um dos sete problemas matemáticos mais difíceis para o próximo milênio. O instituto oferece um prêmio no valor de um milhão de dólares para a solução de qualquer um dos sete problemas.

3.1.2 Computação quântica

A unidade básica de informação quântica é o q-bit (*Quantum Binary Digit*). A diferença básica entre o bit e o q-bit é o fato de que os bits quânticos podem assumir estados impossíveis classicamente. Os estados de um bit clássico são mutuamente excludentes, isto é, um bit é 0 ou é 1. Porém bits quânticos podem assumir estados que são superposições dos estados lógicos 0 e 1, como por exemplo:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \tag{3.1}$$

onde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. A propriedade de superposição permite que computadores quânticos operem sobre todos os estado lógicos simultaneamente, característica conhecida como paralelismo quântico. O número de estados lógicos que podem ser transformados em paralelo cresce exponencialmente com o tamanho do computador quântico, uma vez que n q-bits podem codificar 2^n estados lógicos. Para $n = 500$, esse número é maior que o número estimado de átomos no universo. Tentar armazenar e computar estes estados não seria possível em qualquer computador clássico imaginável.

A estratégia comum a todo processamento de informação quântica consiste em preparar n q-bits em um estado de superposição e aplicar operações que provoquem interferências quânticas entre os estados de tal maneira que os estados que não são soluções do problema matemático de interesse, sofram interferência destrutiva e o estado que codifica as soluções sofra interferência construtiva, aumentando assim a probabilidade do computador quântico ser encontrado no estado que codifica a solução procurada.

De forma análoga ao computador clássico, construídos a partir de circuitos elétricos contendo fios e portas lógicas que aplicam operações sobre bits, um computador quântico pode ser construído a partir de um circuito quântico contendo portas lógicas que operam sobre q-bits de acordo com as instruções dadas por um algoritmo quântico. Um circuito quântico representa a evolução temporal dos q-bits, ao contrário da computação clássica onde os circuitos são fios ou estruturas físicas reais. Em um circuito quântico, um bit quântico é representado por uma linha horizontal e um bit clássico é representado por uma linha dupla. O sentido do tempo flui da esquerda para a direita. A medida que o q-bit caminha no tempo, operações são aplicadas sobre ele, como ilustrado na figura (3.1). Existem três tipos de operações importantes: as portas lógicas que operam apenas sobre um q-bit (3.1c); as portas lógicas controladas (3.1d e 3.1e) que aplicam uma operação

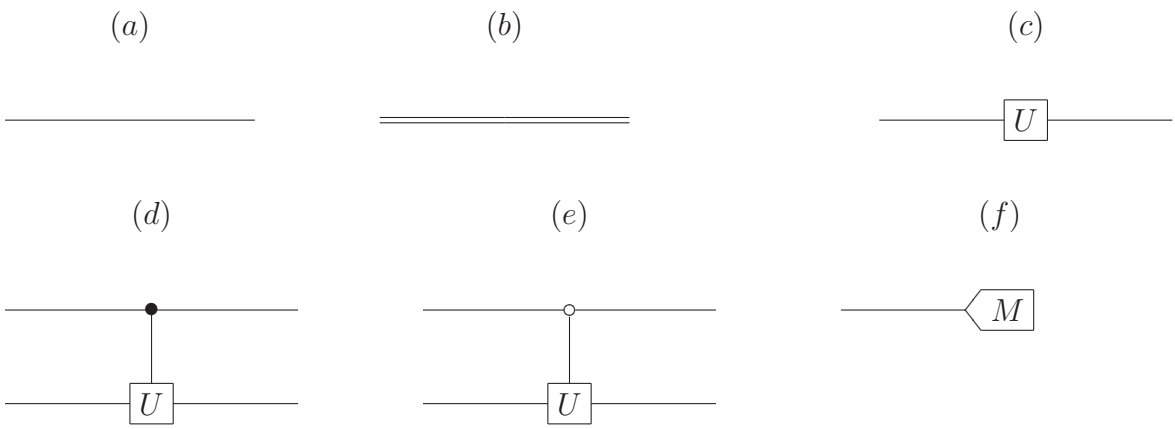


Figura 3.1: Representação dos elementos básicos de um circuito quântico (a) Bit quântico; (b)Bit clássico; (c) Porta lógica de um q-bit; (d) Porta lógica controlada, onde a operação U é aplicada sobre o segundo q-bit se o primeiro estiver no estado $|1\rangle$; (e) Porta lógica controlada, onde a operação U é aplicada sobre o segundo q-bit se o primeiro estiver no estado $|0\rangle$; (f) Um processo de medida.

sobre um determinado q-bit condicional ao estado de outro q-bit e também os processos de medidas (3.1f), usualmente colocados no final do circuito.

A implementação física de um q-bit é um sistema quântico de dois níveis, como por exemplo um spin 1/2 imerso em um campo magnético, ou dois estados de polarização (vertical ou horizontal) de um fóton. A implementação das portas lógicas depende do tipo de computador quântico, por exemplo: em RMN as portas são pulsos de radio-freqüência aplicados sobre os spins nucleares combinadas com evoluções livres governadas pela Hamiltoniana natural de interação entre os spins. No Apêndice A estão definidas as principais portas lógicas quânticas.

Como na computação clássica, qualquer circuito quântico pode ser construído a partir de um conjunto universal de portas lógicas quânticas. Um exemplo de conjunto universal é formado pelas portas Hadamard, Porta de fase, Porta T e CNOT (ver Apêndice A). A universalidade das portas citadas, implica que qualquer outra operação unitária pode ser aproximada com precisão arbitraria $\epsilon > 0$ usando somente estas portas universais. Porém nem todas as operações unitárias podem ser implementadas eficientemente, existem operações unitárias sobre n q-bits que requerem um número exponencial de portas para serem aproximadas com precisão ϵ [35].

Um exemplo de circuito quântico simples de dois q-bits está ilustrado na figura (3.2). Este circuito é chamado de Gerador de EPR. O circuito consiste de uma porta Hadamard,

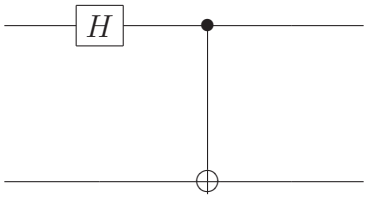


Tabela Verdade do Gerador de EPR

Entrada	Saída
$\|00\rangle$	$\|\phi^+\rangle = (\|00\rangle + \|11\rangle)/\sqrt{2}$
$\|01\rangle$	$\|\psi^+\rangle = (\|01\rangle + \|10\rangle)/\sqrt{2}$
$\|10\rangle$	$\|\phi^-\rangle = (\|00\rangle - \|11\rangle)/\sqrt{2}$
$\|11\rangle$	$\|\psi^-\rangle = (\|01\rangle - \|10\rangle)/\sqrt{2}$

Figura 3.2: Circuito quântico Gerador de EPR e sua tabela verdade.

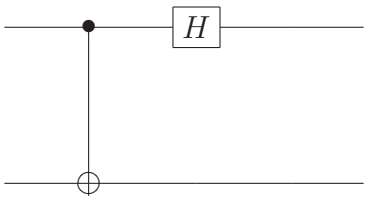


Tabela Verdade do Leitor de EPR

Entrada	Saída
$\|\phi^+\rangle = (\|00\rangle + \|11\rangle)/\sqrt{2}$	$\|00\rangle$
$\|\psi^+\rangle = (\|01\rangle + \|10\rangle)/\sqrt{2}$	$\|01\rangle$
$\|\phi^-\rangle = (\|00\rangle - \|11\rangle)/\sqrt{2}$	$\|10\rangle$
$\|\psi^-\rangle = (\|01\rangle - \|10\rangle)/\sqrt{2}$	$\|11\rangle$

Figura 3.3: Circuito quântico Leitor de EPR e sua tabela verdade.

que cria superposições, aplicada sobre o primeiro q-bit seguida de uma porta CNOT, que inverte o segundo q-bit apenas se o estado do primeiro q-bit for $|1\rangle$ (ver Apêndice A). O Gerador de EPR implementa um mudança de base, ele transforma estados da base computacional em estados da base de Bell. O Leitor de EPR é a operação inversa do Gerador de EPR. O Leitor de EPR transforma estados da base de Bell em estados da Base de computacional. Este circuito é extremamente importante quando uma medida na base de Bell é necessária, como no protocolo de teleporte (ver seção 3.2.2).

O modelo de computação quântica apresentado acima, baseada em circuitos quânticos constituídos de seqüências de portas lógicas unitárias aplicadas sobre q-bits, é apenas um dos modelos de computação propostos. A seguir discutiremos brevemente duas outras propostas de computação quântica: a "computação quântica de mão única"(do inglês *one way quantum computing*) e a "computação quântica adiabática".

A computação de mão única foi inicialmente proposta por Raussendorf e Brigel [78]. Neste modelo, os q-bits são inicializados em um estado emaranhado específico chamado estado de grupo [79] (do inglês *Cluster State*). A computação é feita através de seqüências

de medidas. A medida feita sobre um dado q-bit depende do resultado da medida feita sobre o q-bit anterior. A ordem e a escolha dos q-bits observados são determinadas pelo algoritmo computado. Ao final da computação quase todos os q-bits, exceto alguns, foram observados e colapsaram para um autoestado do operador que representa o processo de medida realizado. Porém, devido ao alto grau de emaranhamento inicial e a escolha adequada das seqüências de medidas, os q-bits que não foram observados colapsam para o estado que é a solução do problema matemático do algoritmo implementado. Então neste momento uma última medida é feita para ler a solução.

Como este modelo de computação envolve essencialmente medidas, um computador de mão única é irreversível. Ao contrário dos computadores baseados em circuitos, onde sempre podemos recuperar o estado inicial revertendo a computação antes da medida final. Apesar dos dois modelos serem fundamentalmente diferentes, eles são equivalentes, ou seja, qualquer computação implementada por um circuito quântico pode ser traduzida em seqüências de medidas aplicadas sobre q-bits preparados em um estado de grupo [78]. Realizações experimentais de computação de mão única com fótons foram reportadas por Walther *et al.* [80], Prevedel *et al.* [81], Tame *et al.* [82] e Chen *et al.* [83].

A computação adiabática consiste em codificar a solução de um problema no estado fundamental de uma dada Hamiltoniana $\mathcal{H}_p$ [84]. Para alcançar o estado fundamental desconhecido, o computador quântico adiabático explora o teorema adiabático [85] que explicaremos a seguir.

Considere uma Hamiltoniana dependente do tempo $\mathcal{H}(t)$, cujos autoestados e autovalores a cada instante são denotados por $|\psi_n(t)\rangle$ e $E_n(t)$, respectivamente. Para um sistema inicialmente preparado no estado fundamental $|\psi_0(t=0)\rangle$, o teorema adiabático estabelece que o estado $|\psi(t)\rangle$ permanecerá no estado fundamental $|\psi_0(t)\rangle$, se a evolução for lenta o suficiente para que a condição $\langle\psi_0(t)|\mathcal{H}(t)|\psi_1(t)\rangle << (E_1(t) - E_0(t))^2$ seja satisfeita. O computador quântico adiabático é um sistema descrito por uma Hamiltoniana do tipo:

$$\mathcal{H}(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right)\mathcal{H}(0) + \frac{t}{T}\mathcal{H}_p, \tag{3.2}$$

com $0 \leq t \leq T$, sendo T o tempo de execução e $\mathcal{H}(0)$ é uma Hamiltoniana cujo estado fundamental é conhecido e fácil de se preparar. Partindo do estado fundamental de $\mathcal{H}(0)$, uma evolução adiabática gera o estado fundamental de $\mathcal{H}_p$, que codifica a solução do problema, em $t = T$. O teorema adiabático garante que a solução sempre será encontrada se o tempo de execução for suficientemente longo e a evolução suficientemente lenta.

Como o computador quântico nunca sai do estado fundamental, a computação quântica adiabática é apontada como sendo mais robusta contra erros causados por descoerência. O grande problema em aberto é se o tempo de execução necessário para o sistema alcançar o estado fundamental de $\mathcal{H}_p$ cresce polinomialmente ou exponencialmente com o número de q-bits necessários para resolver o problema. Se for possível alcançar qualquer solução em tempo polinomial, a computação quântica adiabática poderá ser de grande utilidade.

Um exemplo de problema computacional da classe ***coNP*** resolvido por um computador adiabático é dado em [84]. Neste artigo, Farhi *et al.* construíram uma Hamiltoniana cujo estado fundamental codifica a solução de um problema chamado *Exact Cover*. A Hamiltoniana é fácil de ser construída, porém a determinação de seu estado fundamental é um problema computacional difícil para computadores clássicos. Não foi possível para os autores determinar se o tempo de execução neste caso é polinomial ou exponencial. Lembrando que um algoritmo que resolva um problema da ***coNP*** pode ser adaptado para resolver qualquer outro problema de ***NP***, o algoritmo quântico de Farhi *et al.* pode, em princípio, ser adaptado para resolver qualquer outro problema ***NP***. Desta forma, se for demonstrado que o algoritmo proposto em [84] é eficiente para resolver o problema *Exact Cover*, então ele também será eficiente para resolver qualquer outro problema ***NP***, inclusive a fatoração. Experimentalmente a computação adiabática foi realizada utilizando a técnica de RMN em um sistema de três q-bits por Steffen *et al.* [86] e de dois q-bits por Mitra *et al.* [87]. Por fim, é importante ressaltar que qualquer circuito quântico pode ser traduzido para o modelo de computação quântica adiabática [88].

3.1.3 Algoritmos quânticos

Até o momento, são conhecidas três classes de algoritmos quânticos [35,89]: a primeira classe é composta de algoritmos que usam a transformada de Fourier quântica (TFQ) para obter ganho exponencial de velocidade em relação aos computadores clássicos. A segunda classe é baseada no algoritmo de Grover para a realização de busca quântica, cujo ganho de velocidade é apenas polinomial, e a terceira classe de algoritmos são aqueles usados para simular sistemas quânticos. A seguir apresentaremos brevemente as três classes de algoritmos.

3.1.3.1 Algoritmos com ganho exponencial de velocidade

A primeira classe de algoritmos é composta por aqueles que usam a transformada de Fourier quântica [35]. Esta é a classe mais surpreendente de todas, pois oferece um ganho exponencial de velocidade em relação aos melhores algoritmos clássicos conhecidos. A transformada de Fourier clássica é uma operação que recebe um conjunto de N números complexos $x_0 \dots x_{N-1}$ e transforma em outro conjunto de números complexos $y_0 \dots y_{N-1}$ definidos por:

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{2\pi i j k/N}. \tag{3.3}$$

A transformada de Fourier quântica é exatamente a mesma transformação, aplicada às amplitudes dos estados quânticos. A transformada de Fourier quântica sobre um estado arbitrário é definida como:

$$\mathcal{TFQ}\left[\sum_{j=0}^{N-1} x_j|j\rangle\right] = \sum_{k=0}^{N-1} y_k|k\rangle, \tag{3.4}$$

onde o vetor y é a transformada de Fourier discreta do vetor inicial x. O circuito quântico que aplica esta transformada é mostrado na figura (3.4). O circuito se inicia com uma porta Hadamard, no primeiro q-bit, seguida de $n-1$ portas de fase controladas, totalizando n operações. Novamente uma operação Hadamard é aplica, desta vez no segundo q-bit, seguida de $n-2$ portas de fase controladas, totalizando $n+(n-1)$ operações. Este procedimento é repetido até o último q-bit do circuito. Ao final do circuito, é necessário trocar o estado do último q-bit com o primeiro, o do segundo com o penúltimo, e assim sucessivamente. Logo, aplicações de portas de troca se fazem necessárias. Ao final do processo $n(n+1)$ portas Hadamard e de fase controlada são usadas. Somando as $n/2$ portas de troca usadas no final do circuitos, temos que a transformada de Fourier quântica utiliza da ordem de n^2 portas lógicas. Em contraste, o melhor algoritmo clássico para transformada de Fourier discreta utiliza da ordem de $n2^n$ portas lógicas [35].

Surpreendentemente, a transformada de Fourier quântica é usada em todos os algoritmos conhecidos com ganho exponencial de velocidade. O principal deles é o algoritmo de fatoração de Shor [35]. Este algoritmo é a aplicação mais importante dos computadores quânticos conhecida até hoje. A razão disso é que a fatoração pode ser usada para quebrar sistemas de criptografia. Atualmente o melhor algoritmo clássico de fatoração requer aproximadamente $\exp(n^{1/3} log_2^{2/3} n)$ operações lógicas para fatorar um número inteiro de

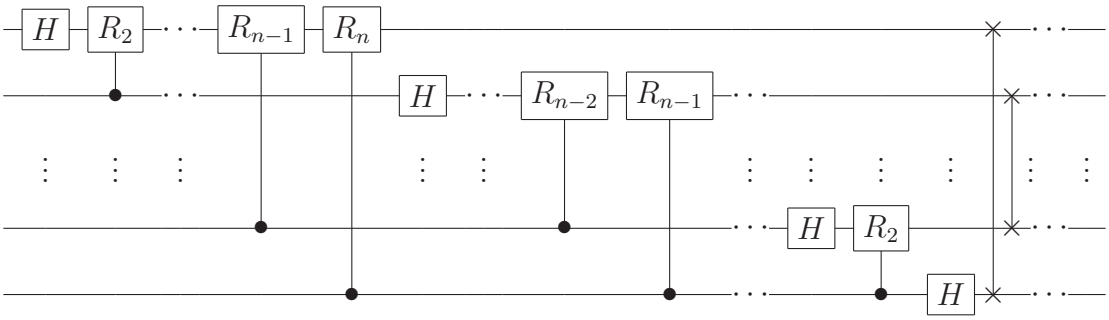


Figura 3.4: Circuito quântico da transformada de Fourier quântica.

n bits, enquanto o algoritmo de Shor usa apenas $n^2 \log_2 n \log_2 \log_2 n$ operações para fazer a mesma tarefa. Se estima que um computador atual fatora um número com 1024 bits em 100 mil anos enquanto um computador quântico levaria apenas 5 minutos [74].

Experimentalmente, a transformada de Fourier quântica foi demonstrada pela primeira vez com a RMN por Weinstein *et al.* [90]. A maioria das implementações da TFQ foram realizadas como uma subrotina de outros algoritmos. Uma compilação de vários algoritmos que usam a TFQ e foram implementados experimentalmente com a RMN pode ser encontrada em Oliveira *et al.* [74]. Contudo, a melhor demonstração experimental foi a do algoritmo de Shor, demonstrado em 2001 por Vandersypen *et al.* [91] usando a técnica de RMN. O algoritmo foi implementado em um sistema de sete q-bits, cinco núcleos de ^{19}F e dois núcleos de ^{13}C (ver figura (3.5)). No experimento, foram utilizados 300 pulsos de radiofreqüência intercalados por evoluções livres para fatorar o número 15. Até hoje essa é considerada a demonstração de computação quântica mais complexa já realizada.

3.1.3.2 Algoritmos com ganho polinomial de velocidade

Esta classe de algoritmos quânticos é baseada no algoritmo de Grover para a realização de uma busca em uma lista desordenada. Um algoritmo de busca encontra um ou mais elementos em um conjunto com N componentes sem nenhum conhecimento prévio sobre a organização dos elementos dentro do conjunto. Classicamente esse problema requer aproximadamente N operações, que correspondem ao processo de verificação, através de uma observação, se cada elemento é o elemento procurado ou não. O algoritmo quântico de busca proposto por Lov Grover em 1997 [92] é capaz de encontrar o elemento procurado em aproximadamente $\sqrt{N}$ operações. Portanto, o algoritmo de Grover oferece um ganho

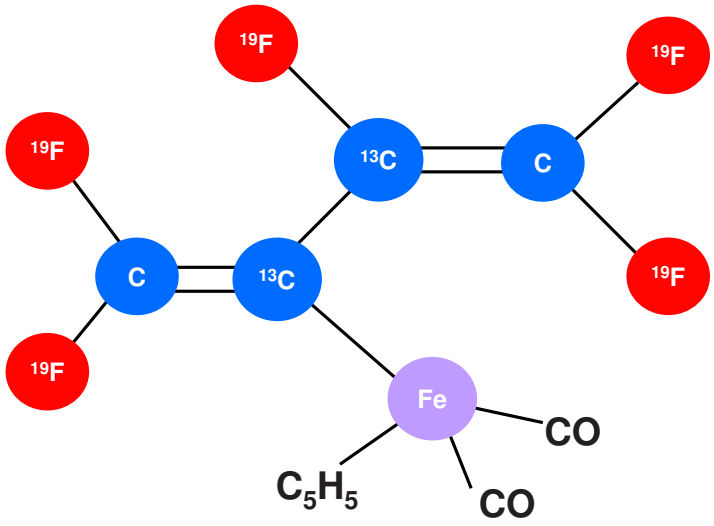


Figura 3.5: Molécula utilizada na implementação do algoritmo de Shor. Os q-bits são os cinco núcleos dos átomos de ^{19}F, indicados pela cor vermelha, e os 2 núcleos dos átomos de ^{13}C, indicados pela cor azul.

quadrático de velocidade, sobre seus análogos clássicos.

Além da busca em bancos de dados, o algoritmo de Grover pode ser usado para acelerar problemas ***coNP***, especificamente aqueles para os quais uma busca de soluções é a melhor técnica conhecida, e também para encontrar chaves criptográficas. Essas e outras aplicações são explicadas em detalhes no livro de Nielsen e Chuang [35]. Experimentalmente, o algoritmo de Grover foi implementado com RMN em sistemas de dois [93–95] e três q-bits [96]. Além da RMN, o algoritmo de Grover também foi demonstrado experimentalmente com fótons [80, 83] e íons atômicos [97].

3.1.3.3 Simulações de sistemas quânticos

A idéia de simular sistemas quânticos com computadores quânticos foi inicialmente proposta por Feynman [98] e posteriormente desenvolvida em trabalhos recentes, como os de Lloyd [99] e Zalka [100]. Uma revisão recente sobre simulações quânticas pode ser encontrada em [101]. Simular sistemas quânticos reais é provavelmente uma das aplicações mais importantes da computação. Porém, computadores clássicos possuem limitações que tornam simulações de muitos sistemas quânticos extremamente complicadas. Somente em alguns casos, sistemas quânticos podem ser simulados eficientemente em computadores clássicos usando técnicas de Monte Carlo [102]. A razão de os computadores clássicos não

conseguirem simular eficientemente alguns sistemas quânticos é a mesma pela qual eles não conseguem simular computadores quânticos: a quantidade de variáveis necessárias para acompanhar a evolução de um sistema quântico cresce exponencialmente com o número de partículas envolvidas na simulação. Em geral, armazenar o estado quântico com n partículas em um computador clássico requer c^n bits de memória, onde c é uma constante que depende do sistema simulado. Ao contrário, um computador quântico pode realizar a simulação de n q-bits usando apenas n q-bits. Isso permite um ganho exponencial de memória sobre os computadores clássicos.

A evolução temporal de um sistema quântico descrito por uma Hamiltoniana $\mathcal{H}_s$ é dada por:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar}|\psi(0)\rangle. \tag{3.5}$$

A idéia básica de um algoritmo de simulação consiste em aplicar um conjunto de portas lógicas $U_k(t_k)$ tal que:

$$e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar} = \prod_k U_k(t_k), \tag{3.6}$$

onde $\sum_k t_k = t$. A transformação $e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar}$ pode ser sempre aproximada por um conjunto finito de operações unitárias com precisão arbitrária [35]. Algumas simulações podem requerer um número exponencial de portas universais, por isso alguns autores [103, 104] enfatizam que o ganho exponencial de memória não é garantia de que computadores quânticos possam simular eficientemente qualquer sistema quântico.

Muitos sistemas de interesse são descritos por uma Hamiltoniana do tipo

$$\mathcal{H}_s = \sum_k \mathcal{H}_k, \tag{3.7}$$

onde $\mathcal{H}_k$ atua somente em uma pequena parte do sistema. Quando todos os termos de (3.7) comutam entre si, a simulação da evolução de $\mathcal{H}_s$ é exata, uma vez que $e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar} = \prod_k e^{-i\mathcal{H}_k t/\hbar}$. Entretanto, em geral $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] \neq 0$, o que significa que $e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar} \neq \prod_k e^{-i\mathcal{H}_k t/\hbar}$. Neste caso a evolução do sistema é aproximada usando a fórmula de Trotter [35]. Em primeira ordem a fórmula de Trotter é dada por [104]:

$$e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar} = \prod_k e^{-i\mathcal{H}_k t_k/\hbar} + \mathcal{O}(t^2) \tag{3.8}$$

Para $t \to 0$, podemos aproximar a evolução por $e^{-i\mathcal{H}_s t/\hbar} \approx \prod_k e^{-i\mathcal{H}_k t_k/\hbar}$. Aproximações de ordens superiores podem ser encontradas em [105]. Após a simulação, o

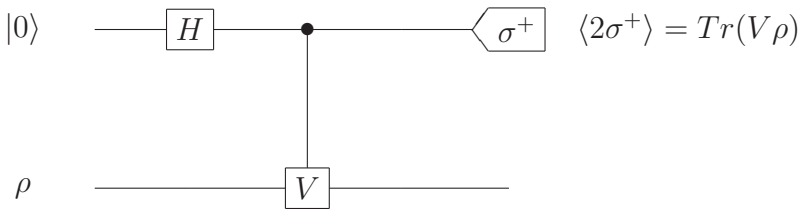


Figura 3.6: Representação do circuito de espalhamento

estado do computador quântico será o mesmo do sistema quântico simulado. Entretanto, a reconstrução do estado envolve um número de medidas que cresce exponencialmente com o tamanho do sistema e logo não é eficiente. Para contornar este problema, podemos usar q-bits auxiliares como sondas que extraem quantidades físicas de interesse, tal como o valor médio da energia ou magnetização, sem a necessidade de reconstruir todo o estado. A base da construção de circuitos quânticos que realizam esta tarefa é o circuito de espalhamento, ilustrado na figura (3.6).

A linha superior do circuito representa um único q-bit auxiliar, inicialmente preparado no estado $|0\rangle$, e a linha inferior representa N q-bits no estado ρ. O circuito implementa a operação unitária V controlada e posteriormente uma medida do operador σ^+ é realizada somente no primeiro q-bit. O operador σ^+ não é um observável, porém pode ser escrito como uma combinação de observáveis de spin $\sigma^+ = (\sigma^x + i\sigma^y)/2$. Assim o valor esperado de σ^+ pode ser medido a partir dos valores esperados de σ^x e σ^y. O circuito precisa ser repetido N vezes para se obter uma estimativa de $\langle\sigma^+\rangle$ com precisão $\sqrt{N}$ [101]. É possível mostrar que $\langle 2\sigma^+\rangle = \langle V\rangle$ [103, 104]. Portanto o valor médio do operador unitário de N q-bits pode ser obtido a partir do valor médio de apenas um q-bit auxiliar. Escrevendo o observável de interesse na forma:

$$O = \sum_i \sum_j \cdots \sum_k a_{i,j,\cdots,k} V_i V_j \cdots V_k, \tag{3.9}$$

onde V_i são operadores unitários e $a_{i,j,\cdots,k}$ são coeficientes, podemos utilizar o circuito (3.6) para medir cada termo de (3.9) separadamente ou podemos introduzir q-bits auxiliares adicionais e usar aplicações repetidas do circuito de espalhamento para medir o valor médio de O de uma só vez [104].

A primeira implementação experimental de uma simulação quântica foi feita com a técnica de RMN em 1999 por Somaroo *et al.* [106], que relataram a simulação de um oscilador harmônico truncado em um sistema de dois q-bits. Ainda em 1999, Tseng

et al. [107] simularam com RMN uma interação não física de três corpos, descrita por uma Hamiltoniana do tipo $J_{123}\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_3^z$. Posteriormente outros experimentos envolvendo a RMN foram implementados: Khitrin e Fung implementaram uma simulação da propagação de uma partícula por uma cadeia linear de oito sítios [108], Negrevergne *et al.* implementaram a simulação do modelo de Fano Anderson [109], Yang *et al.* implementaram uma simulação da teoria BCS da supercondutividade [110] e Peng *et al.* simularam uma transição de fase quântica [111].

3.1.4 O poder da computação quântica

Quão potentes podem ser os computadores quânticos? De onde vem o poder deles? Qual o papel do emaranhamento nos algoritmos quânticos? Ninguém até hoje sabe ao certo as respostas para estas perguntas. Atualmente se conhecem algoritmos quânticos que são mais eficientes que os melhores algoritmos clássicos conhecidos. Porém ninguém conseguiu provar até o momento que não seja possível encontrar algoritmos clássicos tão bons quanto os quânticos. A conjectura aceita pela maior parte da comunidade científica que trabalha com computação quântica é a de que os computadores quânticos são realmente mais potentes que os computadores clássicos, isto é, existem problemas cujas soluções são eficientemente encontradas somente por computadores quânticos. A fatoração é o representante mais famoso desses problemas. Porém, até mesmo os computadores quânticos devem ter suas limitações. Alguns cientistas da computação acreditam que nem todo problema $\boldsymbol{NP}$ possa ser resolvido eficientemente, nem mesmo em computadores quânticos (ver uma recente revisão sobre algoritmos quânticos por Peter Shor [89] e a discussão sobre o poder da computação quântica no livro de Nielsen e Chuang [35]).

Supondo que os computadores quânticos são realmente mais potentes que os computadores clássicos, pelo menos para alguns problemas $\boldsymbol{NP}$. Podemos nos perguntar: de onde vem o poder da computação quântica? O emaranhamento é responsável pelo ganho de velocidade? A primeira e mais comum explicação consiste em atribuir o poder da computação quântica ao paralelismo e a interferência quântica.

A segunda explicação atribui o poder da computação quântica ao emaranhamento. A idéia de que o emaranhamento é o recurso computacional por trás do ganho exponencial de velocidade foi introduzida em [112]. Neste artigo Ekert e Jozsa argumentaram que se prepararmos um estado puro e implementarmos uma evolução que nunca produz um estado emaranhado, a evolução do sistema pode ser eficientemente simulada em um

computador clássico. Em um estado completamente separável, cada q-bit pode ser associado a um vetor bidimensional de módulo 1 chamado vetor de Bloch. Como cada vetor possui dois graus de liberdade, são necessários apenas $2n$ parâmetros para acompanhar a evolução de n q-bits. Entretanto para estados emaranhados esta correspondência não mais é válida, e o número de parâmetros necessários para acompanhar a evolução do sistema pode crescer exponencialmente. Posteriormente, Linden e Popescu [113] demonstraram que o emaranhamento é uma condição necessária para que haja ganho exponencial de velocidade em uma grande classe de algoritmos, tal como o algoritmo de Shor. No entanto, eles não puderam determinar se o emaranhamento é condição suficiente. Além disso, deixaram em aberto a possibilidade de existirem outros algoritmos tão eficientes quanto o de Shor que não utilizam emaranhamento.

Um ponto que é importante enfatizar é o fato de que o emaranhamento não está presente em todos os algoritmos quânticos. Meyer [114] construiu um algoritmo de busca com ganho "polinomial"sobre os algoritmos clássicos que nunca acessa um estado emaranhado.

Por fim, Milburn *et al.* [115] estudaram a dinâmica clássica e quântica de estados no contexto do processamento de informação quântica por RMN e mostraram que mesmo quando o estado é separável a evolução clássica e quântica podem ser diferentes. Os autores conjecturaram que o poder da computação não reside no estado do sistema mas sim na sua dinâmica.

Em resumo, atualmente ninguém pode provar de onde vêm o poder da computação quântica, na verdade ninguém pode provar nem mesmo se a computação quântica é mais eficiente que a computação clássica. No entanto a conjectura que se forma, e poucos duvidam dela, é que a computação quântica é realmente mais eficiente que a computação clássica, pelo menos para uma classe de problemas $\boldsymbol{NP}$. Quanto à questão sobre o poder dos computadores quânticos, uma possível conjectura é de que provavelmente o poder da computação quântica venha da combinação de vários elementos diferentes, ou talvez a combinação de diferentes recursos possam levar a diferentes ganhos de velocidade.

3.2 Comunicação quântica

A comunicação quântica estuda métodos para transmitir e compartilhar informação entre diferentes partes de uma rede de comunicação utilizando recursos quânticos. Ao

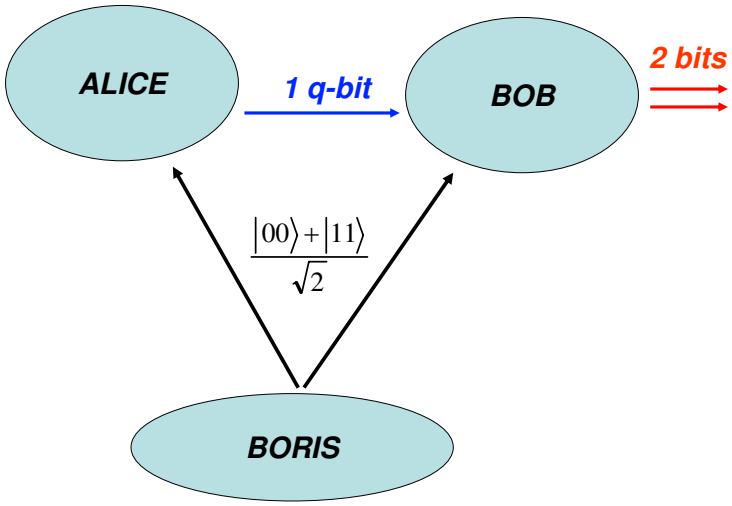


Figura 3.7: Esquema do protocolo de codificação superdensa.

contrário da computação quântica, onde o papel do emaranhado não é bem conhecido, na comunicação quântica o emaranhamento é apontado como recurso necessário e suficiente para que protocolos de comunicação quânticos sejam mais eficientes que os protocolos clássicos. Nesta seção faremos um breve resumo dos principais protocolos de comunicação quânticos e mostraremos a relação que existe entre protocolos de comunicação e desigualdades de Bell.

3.2.1 Codificação superdensa

A codificação superdensa é uma das aplicações mais simples e interessantes do emaranhamento. O objetivo do protocolo é transmitir dois bits de informação clássica usando apenas um bit de informação quântica. O protocolo foi proposto por Bennett *et al.* [116] em 1992 e funciona da seguinte maneira: suponha que Alice queira enviar uma mensagem para Bob. Com dois bits clássicos, Alice pode construir quatro seqüências: 00, 01, 10 e 11, cada uma delas representando uma possível mensagem. No primeiro passo do protocolo, um terceiro parceiro, que chamaremos de Boris, cria um par de q-bits no estado emaranhado

$$|\phi^+\rangle = \frac{(|00\rangle + |11\rangle)}{\sqrt{2}}. \tag{3.10}$$

Boris envia um q-bit do par emaranhado para Alice e outro para Bob, como ilustrado na figura (3.7). Neste ponto, Alice codifica a mensagem que ela quer enviar em um dos

quatro estados de Bell da seguinte maneira: se a mensagem for 00 ela não faz nada em seu q-bit. Se a mensagem for 01, ela aplica a porta Z ao seu q-bit. Se a mensagem enviada for 10, ela então aplica a porta NOT ao seu q-bit e se a mensagem for 11, ela aplica a porta iY ao seu q-bit[3]. Dependendo da operação aplicada, o estado final do par emaranhado compartilhado por Alice e Bob poderá ser uma das quatro possibilidades:

$$00 \rightarrow |\phi^+\rangle = \frac{(|00\rangle + |11\rangle)}{\sqrt{2}}, \tag{3.11}$$

$$01 \rightarrow |\phi^-\rangle = \frac{(|00\rangle - |11\rangle)}{\sqrt{2}}, \tag{3.12}$$

$$10 \rightarrow |\psi^+\rangle = \frac{(|10\rangle + |01\rangle)}{\sqrt{2}}, \quad \text{e} \tag{3.13}$$

$$11 \rightarrow |\psi^-\rangle = \frac{(|10\rangle - |01\rangle)}{\sqrt{2}}. \tag{3.14}$$

No próximo passo, Alice envia o seu q-bit para Bob e ele implementa o circuito Leitor de EPR (3.3), transformando o estado de Bell em um estado da base computacional e decodificando assim a mensagem de Alice. Em resumo, Alice envia apenas um q-bit, porém Bob recebe dois bits de informação clássica. Experimentalmente, a codificação superdensa foi implementada com fótons [117], RMN [118] e íons confinados em cavidades [119].

3.2.2 Teleporte

O teleporte é uma das aplicações mais importantes do emaranhamento. O objetivo do protocolo é transmitir o estado arbitrário $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ sem que o objeto físico que carrega o estado seja transmitido. O protocolo foi proposto por Bennett *et al.* [120] em 1993 e posteriormente desenvolvido por Brassard *et al.* [121]. Para implementar o teleporte, novamente Alice e Bob precisam compartilhar um par de q-bits emaranhados fornecido por Boris. O esquema utilizado para a implementação do protocolo é ilustrado na figura (3.8) e o circuito quântico que representa o teleporte é mostrado na figura (3.9). A linha superior do circuito representa o q-bit que Alice quer teleportar, a segunda e terceira linha representam o par emaranhado fornecido por Boris, sendo que o segundo q-bit está com Alice e o terceiro com Bob.

[3]Para as definições das portas Z, NOT e iY ver Apêndice A

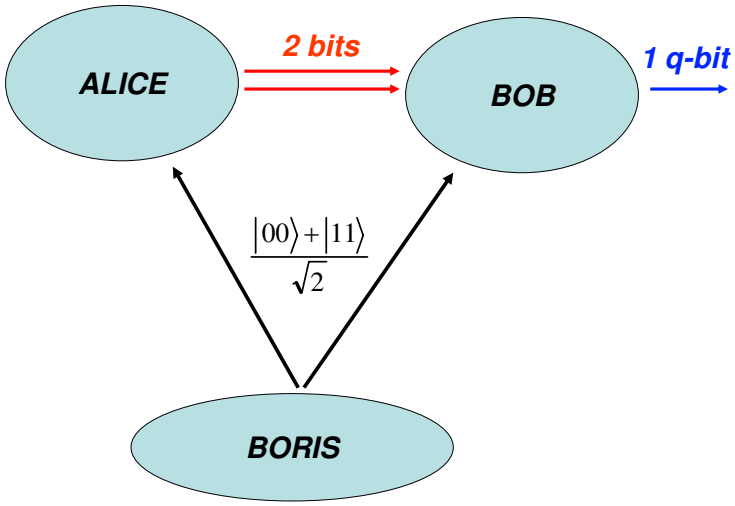


Figura 3.8: Esquema do protocolo de teleporte.

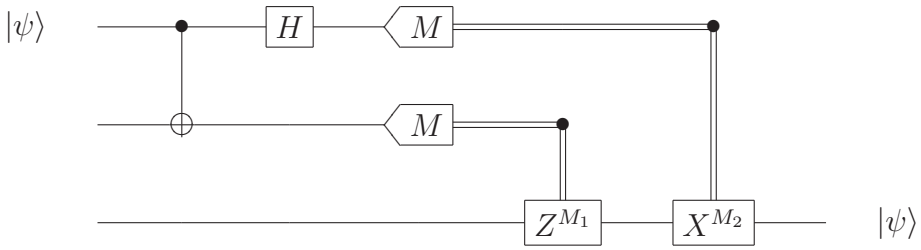


Figura 3.9: Circuito quântico do protocolo de teleporte.

No começo do processo, o estado global do sistema é dado por:

$$|\psi\rangle \otimes \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}\right) = |\psi\rangle \otimes |\phi^+\rangle. \tag{3.15}$$

No primeiro passo do teleporte, Alice implementa uma medida na base de Bell sobre os dois q-bits que estão com ela. Para isso, ela implementa o Leitor de EPR, que faz uma mudança de base entre a base de Bell e base computacional. Após o procedimento inicial, Alice realiza uma medida na base computacional. Dependendo do resultado da

medida, o q-bit de Bob vai colapsar em um dos quatro estados possíveis:

$$00 \rightarrow \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \tag{3.16}$$

$$01 \rightarrow \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle, \tag{3.17}$$

$$10 \rightarrow \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle, \tag{3.18}$$

$$11 \rightarrow \alpha|1\rangle - \beta|0\rangle. \tag{3.19}$$

Para completar o teleporte, Alice comunica o resultado de sua medida para Bob, por algum meio de comunicação clássico. Após receber a mensagem, Bob reconstrói o estado original, aplicando sobre o seu q-bit a operação $X^{M_2}Z^{M_1}$, onde M_1 e M_2 são os resultados encontrados nas medidas feitas por Alice sobre o primeiro e o segundo q-bit respectivamente. Por exemplo se $M_1 = 0$ e $M_2 = 0$, Bob não precisa fazer nada sobre o seu q-bit, porém se $M_1 = 1$ e $M_2 = 0$ Bob aplica a operação $X^0Z^1 = Z$.

Aparentemente, o teleporte parece criar uma cópia do estado que está sendo transmitido instantaneamente, o que seria uma violação do teorema da não clonagem e da teoria da relatividade. Porém, esta violação não ocorre, pois ao final do teleporte somente o q-bit de Bob está no estado $|\psi\rangle$, e o q-bit que inicialmente estava nesse estado termina em $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, pois seu estado é alterado durante o processo de medida. Além disso, é importante notar que para o teleporte ser completado, dois bits de informação clássica devem ser transmitidos por Alice. O canal clássico entre Alice e Bob está limitado pela velocidade da luz, de modo que o teleporte não pode ser realizado instantaneamente. Do ponto de vista de aplicações o teleporte é extremamente importante no transporte de dados quânticos e pode ser usado para construir portas lógicas resistentes a erros [122].

Os primeiros experimentos de teleporte foram feitos com fótons em 1997 [123] e 1998 [124]. Entretanto, essas demonstrações omitiram o último passo do teleporte, a operação unitária aplicada por Bob condicionada ao resultado da medida de Alice. O primeiro experimento de teleporte completo foi feito por Nielsen, Knill e Laflamme com spins nucleares em 1998 [125]. Neste experimento a medida projetiva feita por Alice foi substituída pelo processo de descoerência natural dos spins. O teleporte nos moldes da idéia original somente foi implementado experimentalmente em 2004 com átomos por Barrett *et al.* [126] e Riebe *et al.* [127]. Recentemente um experimento de teleporte foi realizado entre dois objetos de natureza diferentes, luz e matéria. Um estado quântico codificado em um pulso de luz foi teleportado para um objeto macroscópico, um *ensemble*

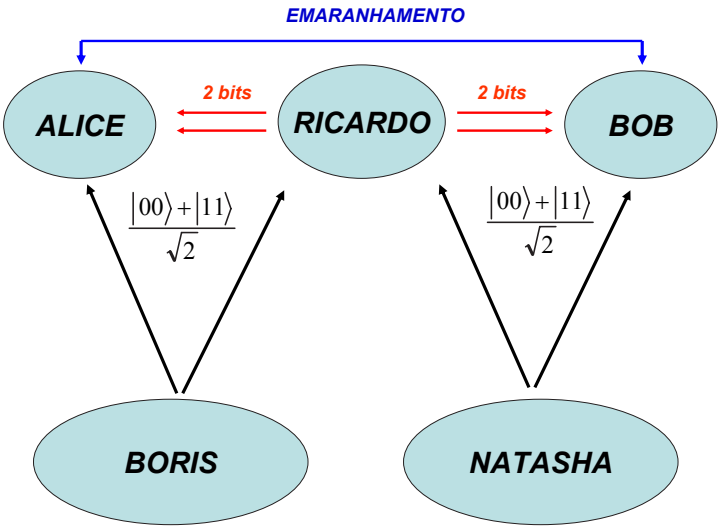


Figura 3.10: Esquema do protocolo de troca de emaranhamento.

de átomos contendo aproximadamente 10^{12} átomos de césio [128].

3.2.3 Troca de emaranhamento

O protocolo de troca de emaranhamento foi inicialmente proposto por Żukowski *et al.* [129]. Este protocolo pode ser interpretado como um teleporte de um estado emaranhado. O objetivo é emaranhar dois q-bits que nunca interagiram entre si. O esquema para esta tarefa é mostrado na figura (3.10). Duas fontes de q-bits emaranhadas são utilizadas. A primeira fonte (indicada como Boris) cria o par emaranhado no estado $|\phi^+\rangle$ e envia uma partícula para Alice e outra para um parceiro auxiliar, que chamaremos de Ricardo. A fonte número 2 (indicada como Natasha) cria um par emaranhado no mesmo estado $|\phi^+\rangle$ e manda um q-bit para Bob e outro para Ricardo. Assim Alice fica de posse do q-bit número 1, Bob fica com o q-bit número 4 e Ricardo fica com os q-bits 2 e 3. No começo do processo o q-bit 1 (3) está emaranhado com o q-bit 2 (4), porém o par $1-2$ não está emaranhado com o par $3-4$. O estado global do sistema pode então ser descrito por:

$$\left(\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}\right)\otimes\left(\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}\right)=|\phi^+\rangle\otimes|\phi^+\rangle. \tag{3.20}$$

A troca de emaranhamento acontece da seguinte maneira: Ricardo realiza uma medida na base de Bell sobre os dois q-bits que ficaram com ele. Dependendo do resultado da medida feita por Ricardo, o estado do q-bit número 1 e do q-bit número 4 poderão

colapsar para quatro estados possíveis:

$$00 \rightarrow |\phi^+\rangle = \frac{(|00\rangle + |11\rangle)}{\sqrt{2}}, \tag{3.21}$$

$$01 \rightarrow |\psi^+\rangle = \frac{(|01\rangle + |10\rangle)}{\sqrt{2}}, \tag{3.22}$$

$$10 \rightarrow |\phi^-\rangle = \frac{(|00\rangle - |11\rangle)}{\sqrt{2}}, \tag{3.23}$$

$$11 \rightarrow |\psi^-\rangle = \frac{(|01\rangle - |10\rangle)}{\sqrt{2}}. \tag{3.24}$$

Em todas as quatro possibilidades, o par de q-bits $1 - 4$, que nunca interagiram entre si em nenhum momento do protocolo, ficam em um estado maximamente emaranhado. Note que Alice e Bob não sabem qual estado emaranhado possuem. Portanto, a troca de emaranhamento se completa com uma mensagem de Ricardo para Alice e Bob comunicando o resultado da sua medida.

Aplicações repetidas da troca de emaranhamento pode em princípio transferir emaranhamento para q-bits remotamente distantes. Como a transmissão de q-bits por meios físicos reais através de grandes distâncias está sempre limitada pela descoerência, a troca de emaranhamento aparece como um importante protocolo que permite emaranhar q-bits separados por grandes distâncias. No contexto da desigualdade de Bell, a troca de emaranhamento pode ser utilizada para testar o realismo local entre partículas remotamente separadas. Experimentalmente, a troca de emaranhamento foi implementada por Jennewein *et al.* [130]. Neste experimento dois fótons originados de duas fontes independentes foram emaranhados e a violação da desigualdade de Bell entre eles foi observada.

3.2.4 Desigualdades de Bell e comunicação

A complexidade de comunicação estuda a quantidade de informação que parceiros de uma rede de comunicação precisam trocar entre si para realizar uma determinada tarefa. Este campo de estudo é extremamente importante para a otimização da computação distribuída em redes de computadores.

Considere o seguinte problema de complexidade de comunicação: Alice possui o conjunto de bits x e Bob possui o conjunto y. Um não conhece os dados que o outro possui, porém eles precisam computar uma certa função $f(x, y)$. O protocolo óbvio para esta tarefa consiste em Alice mandar o seu conjunto de bits para Bob, ele então computa

$f(x, y)$ e manda o resultado de volta para Alice. Porém, como eles poderiam computar a função se a quantidade de informação que Alice e Bob podem trocar for limitada? Qual é a maior probabilidade possível para Alice e Bob computarem o valor correto da função se apenas uma quantidade restrita de comunicação for permitida? Essas são algumas das questões que a complexidade de comunicação se propõe a responder. Surpreendentemente foi identificado que problemas de comunicação, como o descrito acima, podem ser sempre associados a uma desigualdade de Bell e que a probabilidade de sucesso de protocolos quânticos que usam estados emaranhados que violam tais desigualdades − isto é, violam o realismo local − é sempre superior a de qualquer protocolo clássico criado para o mesmo problema.

Para mostrar como a conexão entre desigualdades de Bell e os problemas de complexidade de comunicação surge, vamos considerar o exemplo desenvolvido em [131]. Alice recebe o conjunto de dois bits $z_1 = (x_1, y_1)$ e Bob recebe o conjunto $z_2 = (x_2, y_2)$, onde $y_1, y_2 \in [-1, 1]$ e $x_1, x_2 \in [-1, 1]$. A tarefa de Alice e Bob é computar a função

$$f(z_1, z_2) = y_1 y_2 (-1)^{x_1 x_2} \tag{3.25}$$

com a maior probabilidade de sucesso possível, porém trocando apenas dois bits de informação. Antes de iniciar o protocolo, Alice e Bob podem compartilhar um conjunto de parâmetros classicamente correlacionados, denotados por λ_a e λ_b, para auxiliar na implementação do protocolo. O protocolo clássico mais eficiente para esta tarefa [131] consiste em Alice calcular localmente uma função $a(x_1, \lambda_a)$ e Bob calcular localmente $b(x_2, \lambda_b)$. Alice envia a quantidade $e_a = y_1 a$ para Bob e ele envia $e_b = y_2 b$ para Alice. Então ambos atribuem $e_a e_b$ como sendo o valor de $f(z_1, z_2)$.

Agora, consideremos que em vez de compartilharem um conjunto de dados classicamente correlacionados, Alice e Bob compartilham um par de q-bits emaranhados. Com o par emaranhado como sistema auxiliar, eles implementam o seguinte protocolo quântico: se o bit x_1 que Alice recebe for igual a 0, ela mede o observável A_0 no seu q-bit. Se x_1 for 1, ela mede o observável A_1. Bob segue o mesmo protocolo, se ele receber $x_2 = 0$, mede B_0 e se receber $x_2 = 1$, ele mede B_1. O valor da medida obtido por Alice é denotado por a e o valor obtido por Bob é indicado por b, sendo que a e b somente podem assumir dois valores: ± 1. Para finalizar o protocolo Alice envia a quantidade $e_a = y_1 a$ para Bob e ele envia $e_b = y_2 b$ para Alice. Então ambos atribuem $e_a e_b$ como sendo o valor de $f(z_1, z_2)$.

A probabilidade do valor atribuído a $f(z_1, z_2)$ ser o valor correto no protocolo clássico

e quântico é dada por [131]:

$$P = \frac{1}{4}[P_{0,0}(ab = 1) + P_{0,1}(ab = 1) + P_{1,0}(ab = 1) + P_{1,1}(ab = -1)] \tag{3.26}$$

onde, por exemplo: $P_{0,0}(ab = 1)$ é a probabilidade do produto ab ser igual a um quando $x_1 = 0$ e $x_2 = 0$. O ponto crucial para ligar desigualdades de Bell com o problema de complexidade, é notar que o protocolo clássico descrito acima pode ser considerado um modelo realístico-local para o protocolo quântico, sendo os parâmetros λ_a e λ_b, as variáveis ocultas. A equação (3.26) pode ser identificada como uma versão da desigualdade de CHSH. Portanto existe um limite para a equação (3.26) imposto pelo realismo local. Pode se verificar que a probabilidade de sucesso do protocolo clássico é limitada por $P \leq 0.75$ [131]. O protocolo quântico vai superar este limite se e apenas se o estado dos q-bits auxiliares violar a desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt. De fato, com uso de estados maximamente emaranhados, a probabilidade de sucesso do protocolo quântico é 0.85 [131]. É possível mostrar que as idéias apresentadas acima podem ser generalizadas para qualquer tipo de problema de comunicação [131]. Assim, é sempre possível associar uma desigualdade de Bell, mesmo aquelas que ainda não foram descobertas, a um problema de complexidade de comunicação. A violação de tal desigualdade é a condição necessária e suficiente para que o protocolo quântico seja mais eficiente que seu análogo clássico. Alguns protocolos de comunicação baseados na violação do realismo local podem ser encontrados em [132–134].

3.3 Criptografia quântica

Existem dois tipos de sistemas criptográficos: a criptografia de chave privada e a criptografia de chave pública. Na criptografia de chave privada, se Alice deseja enviar uma mensagem para Bob, ela deve ter uma chave codificadora que lhe permita criptografar a sua mensagem e Bob deve ter uma chave decodificadora apropriada que lhe permita decifrar a mensagem de Alice. Um exemplo de sistema criptográfico simples é o cifrador de Vernam [35, 75]. Neste sistema Alice faz a codificação adicionando a mensagem e a chave, enquanto que Bob decodifica a mensagem fazendo a subtração, como ilustrado na figura (3.11). O sistema de chave privada é seguro se a distribuição da chave for segura.

No sistema de chave pública, se Alice deseja enviar uma mensagem para Bob, primeiramente Bob deve criar uma chave pública P e uma chave secreta S. Bob então publica

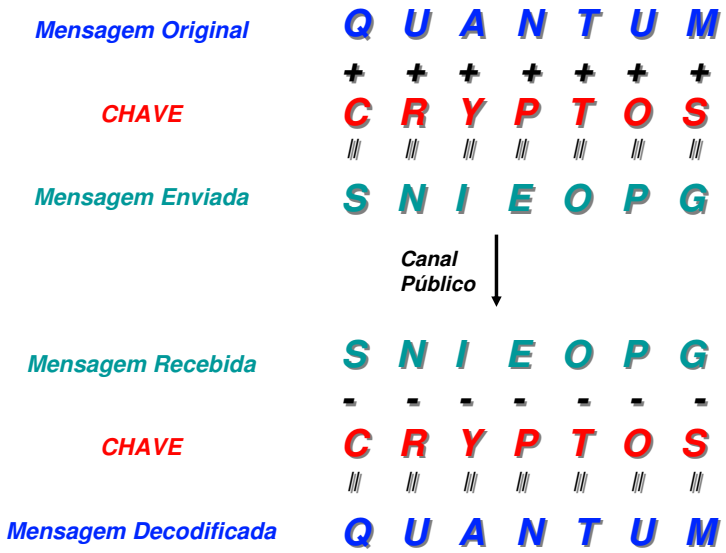


Figura 3.11: Cifrador de Vernam. Neste exemplo, as letras do alfabeto são associadas a números. A mensagem QUANTUM é encriptada adicionando a chave CRYPTOS. O resultado é a mensagem SNIEOPG, enviada pelo canal público. Somente quem possui a chave CRYPTOS pode decodificar corretamente a mensagem original.

P de tal forma que qualquer pessoa pode ter acesso a ela. Alice obtém uma cópia da chave pública e encripta a mensagem que ela quer enviar secretamente com essa chave. Ao receber a mensagem codificada, Bob usa sua chave secreta e decifra a mensagem. Para que o protocolo funcione, é importante que a mensagem seja encriptada de tal maneira que a sua decodificação, mesmo de posse da chave pública, seja extremamente difícil de realizar. Assim, a criptografia de chave pública elimina o problema da distribuição de chave. Porém, ninguém sabe dizer se este sistema é totalmente seguro. A segurança em sistemas de chave publica se baseia em hipóteses matemáticas não demonstradas. Por exemplo: a segurança do sistema RSA de criptografia (ver apêndice 5 do livro de Nielsen e Chuang [35]) se baseia na hipótese de que computadores clássicos não podem fatorar números grandes eficientemente. No entanto, a única razão pelo qual se acredita que não se pode fatorar números grandes em computadores clássicos está no fato de que muito esforço tem sido feito para encontrar um algoritmo clássico de fatoração eficiente, porém sem nenhum resultado.

A criptografia quântica oferece um método seguro para a distribuição de chaves privadas. O primeiro protocolo de criptografia quântica, o BB84, foi proposto em 1984

por Charles Bennett e Gilles Brassard [35, 76]. O objetivo do protocolo é distribuir uma seqüência de bits clássicos, que formarão uma chave privada, de forma segura. O BB84 funciona da seguinte maneira: Alice gera duas seqüências aleatórias, a e b, com N bits cada:

$$a = 0110100010111100010 \cdots 0001 \tag{3.27}$$

$$b = 1101001101100110100 \cdots 1000 \tag{3.28}$$

Alice prepara N q-bits segundo a seguinte regra: se $b_i = 0$, Alice prepara o q-bit i em um autoestado ($|0\rangle$ ou $|1\rangle$) do operador Z. Se $a_i = 0$, Alice usa o estado $|0\rangle$. Se $a_i = 1$, Alice usa o estado $|1\rangle$. Quando $b_i = 1$, Alice prepara o q-bit i em um autoestado ($|+\rangle$ ou $|-\rangle$) do operador X. Se $a_i = 0$, Alice usa o estado $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$. Se $a_i = 1$, Alice usa o estado $|-\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$. A seqüências (3.27) e (3.28) geram o estado:

$$|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |1\rangle \otimes |+\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |+\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle. \tag{3.29}$$

Neste ponto do protocolo, Alice envia os q-bits para Bob. Ele gera uma seqüência aleatória b' com N bits:

$$b' = 000010011000100111 \cdots 1100. \tag{3.30}$$

Bob realiza uma medida sobre os q-bits enviados por Alice de acordo com a seguinte regra: se $b'i = 0$, ele faz uma medida sobre o q-bit i na base Z, se $b'i = 1$, ele mede na base X. As medidas de Bob resultam em uma seqüência aleatória a':

$$a' = 101010000101010000 \cdots 0101. \tag{3.31}$$

Alice e Bob comparam publicamente b e b', e mantém os pares a_i e a'_i para os quais $b_i = b'_i$. No final do processo, Alice e Bob terminam com a mesma seqüência de bits, que eles podem usar como uma chave criptográfica.

$$
\begin{array}{rcc}
 & & \text{Alice} \\
\text{a} & = & 0110100010111100010\cdots0001 \\
\text{b} & = & 1101001101100110100\cdots1000 \\
 & & \text{Bob} \\
a' & = & 101010000101010000\cdots0101 \\
b' & = & 000010011000100111\cdots1100 \\
 & & \text{xx1xx0x0xxx1xxxx0x}\cdots\text{0x01}
\end{array}
$$

$$\text{Chave} = 10010\cdots001$$

O ponto principal do protocolo BB84 é o uso de estados ortogonais ($|0\rangle$, $|1\rangle$, $|+\rangle$ e $|-\rangle$). Para tentar decifrar a chave, um *hacker* quântico, que chamaremos de Eva, poderia tentar copiar o estado $|\psi\rangle$, porém é impossível clonar estados quânticos não ortogonais [35]. Qualquer tentativa de Eva obter informação ao tentar copiar $|\psi\rangle$ implica em perturbação do sistema. Alice e Bob podem estabelecer um limite aceitável para o ruído no canal, acima do qual o protocolo é abortado e o processo reiniciado. Mesmo que Eva fizesse cópias imperfeitas de $|\psi\rangle$, e esperasse pela publicação de b e b', ela apenas saberia as posições dos bits que foram mantidos na chave e o tamanho da chave. Mas não teria como saber o valor de cada bit da chave, pois a e a' nunca são publicados.

O que garante a segurança do protocolo é a impossibilidade de se clonar estados não ortogonais. Assim, a segurança da criptografia quântica é baseada em um lei física fundamental. Baseado nas propriedades da física quântica, BB84 é comprovadamente seguro mesmo quando há ruído na comunicação entre Alice e Bob e imperfeições do aparato experimental de Bob estão presentes. Porém, quando há imperfeições no aparato experimental de Alice, a fonte que cria o estado $|\psi\rangle$, o protocolo BB84 se torna vulnerável [135, 136]. É neste contexto que o emaranhamento surge na criptografia quântica.

O primeiro protocolo de criptografia que usa emaranhamento foi criado por Artur Ekert [137] em 1991. Novamente Alice e Bob criam duas seqüências de bits aleatórios b e b'. Alice então prepara N estados emaranhados $|\psi\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. Ela fica com um q-bit emaranhado e manda o outro para Bob. Se $b_i = 0$, Alice mede o seu q-bit na Base Z e se $b_i = 1$, Alice mede na base X. Bob aplica o mesmo procedimento, medindo na base Z se $b'_i = 0$ e na base X se $b'_i = 1$. Os resultados das medidas geram seqüências de bits aleatórios a_i e a'_i. Toda vez que $b_i = b'_i$, implica que Alice e Bob mediram na mesma base e portanto seus resultados são perfeitamente correlacionados ($a_i = a'_i$). Assim, Alice e Bob

novamente comparam b e b' publicamente e mantém os pares a_i e a'_i para os quais $b_i = b'_i$. Pode-se mostrar que o protocolo de Ekert é seguro se o estado $|\psi\rangle$ violar a desigualdade de CHSH [138]. Este resultado independe das imperfeições dos aparatos experimentais envolvidos e curiosamente liga mais uma vez a violação da hipótese do realismo local com protocolos quânticos. Acín, Gisin e Masanes [136] generalizaram o resultado e mostraram que para qualquer protocolo de criptografia quântica não ser vulnerável a imperfeições experimentais, deve-se usar estados emaranhados que violem alguma desigualdade de Bell. Um ponto interessante é que a segurança nestes protocolos só é garantida com uma real violação da desigualdade de Bell, ou seja, a fuga da detecção deve ser superada.

O protocolo BB84 foi implementado pela primeira vez em 1992 por Bennett *et al.* [139]. Em 1999, três grupos demonstraram protocolos de criptografia quântico baseados em emaranhamento [140–142]. Em 2007, dois interessantes experimentos [53, 143] demonstraram protocolos de criptografia entre a Ilha de la Palma e a Ilha Tenerife, na Espanha, separadas por 144 Km, usando fótons que se propagavam pelo ar. Em 2004, a primeira transferência bancária usando a criptografia quântica foi realizada na cidade de Viena. Atualmente existem três companhias oferecendo sistemas de criptografia comercias, a Id Quantique da Suíça, a MagiQ Technologies dos Estados Unidos e a SmartQuantum da França.

3.4 Metrologia quântica

Para estimar um parâmetro em sistemas quânticos, tipicamente preparamos uma sonda, deixamos esta interagir com o sistema e então observamos o estado da mesma. Se a dinâmica da interação entre a sonda e o sistema for conhecida, podemos então estimar o parâmetro de interesse comparando o estado inicial e final da sonda. Como a mecânica quântica é uma teoria probabilista, há sempre uma incerteza estatística inerente no processo de medida. Para diminuir a incerteza, podemos usar N sistemas quânticos idênticos, medir todos eles e fazer uma média.

Há dois cenários possíveis para se estimar um parâmetro [144, 145]: No primeiro cenário, que chamaremos de estratégia clássica, N sistemas são preparados independentemente no mesmo estado quântico. No segundo cenário, que chamaremos de estratégia quântica, os N sistemas são preparados em um estado quântico altamente correlacionado, como um estado emaranhado. É possível mostrar que o erro na estimativa do parâmetro

de interesse na primeira estratégia não pode ser menor que $1/\sqrt{N}$, limite conhecido como limite de Heisenberg [144]. Entretanto, na estratégia quântica, que pode empregar emaranhamento, o erro pode chegar a $1/N$.

Até o momento, muitos procedimentos de metrologia que fazem uso do emaranhamento têm sido propostos. Estas propostas possuem aplicações em diversas áreas, tais como espectrocopia, sistemas de posicionamento global e detecção de ondas gravitacionais (para uma revisão atual ver [144]). Também é importante ressaltar que existem procedimentos que alcançam a mesma sensibilidade $1/N$ e não fazem uso de estados emaranhados. Experimentalmente um protocolo de metrologia que faz uso de emaranhamento foi demonstrado por Nagata *et al.* [146].

4

Desigualdades de Bell com RMN

Violações de desigualdades de Bell por estados emaranhados têm sido extensivamente estudadas na literatura. A maioria dos testes experimentais foram realizados utilizando fótons como q-bits. Entretanto, fora do contexto da ótica, poucos resultados experimentais têm sido reportados. A importância deste tópico é evidenciada no crescente número de artigos publicado na literatura atualmente. Em um dos trabalhos que compõem esta tese, desenvolvemos um método para simular experimentos de ótica, onde os spins nucleares fazem o papel dos fótons e suas possíveis orientações em relação ao campo magnético aplicado fazem o papel das polarizações dos campos elétricos dos fótons.

Neste capítulo o método de simulação é apresentado. O procedimento de simulação pode ser usado para simular e prever resultados de diferentes desigualdades de Bell, com configurações distintas e com vários q-bits. Para ilustrar o método, realizamos um experimento de RMN, onde estudamos a violação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt usando um sistema de spins nucleares de dois q-bits e comparamos os resultados com um importante experimento realizado com fótons. Os resultados encontrados são bem descritos pela mecânica quântica e por um modelo de variáveis ocultas [10], especialmente criado para RMN. Por isso chamamos o nosso experimento de uma simulação. A consistência entre a mecânica quântica e o modelo de variáveis ocultas pode ser entendida lembrando que apenas uma pequena fração dos spins são detectados, uma situação semelhante à fuga de detecção introduzida na seção 2.6.2. Até onde sabemos, esta foi a primeira vez que um modelo de variáveis ocultas foi explicitamente comparado com dados experimentais.

Nosso experimento foi realizado a temperatura ambiente, em uma amostra líquida macroscópica contendo um número muito grande de moléculas, cada uma delas atuando

como um sistema independente de dois q-bits. Nesta situação, o *ensemble* de spins constitui uma mistura estatística e sua matriz densidade é não emaranhada, como discutiremos na seção 4.1.4. Entretanto, estados genuinamente emaranhados podem ser obtidos com a RMN em sistemas de spins altamente polarizados. Nesta situação uma forte discrepância entre a mecânica quântica e o modelo de variáveis ocultas é esperada.

Na seção 4.1 serão introduzidos brevemente os conceitos básicos da computação quântica por RMN, necessários para o entendimento do experimento. Na seção seguinte, 4.2, apresentaremos os resultados referentes a este trabalho e na última seção, 4.3, discutiremos a possibilidade de se utilizar a RMN com *ensemble* de spins altamente polarizados para testar aspectos fundamentais da mecânica quântica. Este trabalho foi publicado no periódico *New Journal of Physics* [147].

4.1 Introdução à computação quântica por RMN

Nesta seção são discutidos os tópicos fundamentais relacionados à implementação de experimentos de computação quântica por RMN de líquidos com dois spins 1/2 acoplados. Mais especificamente, iremos tratar do sistema compreendido dos spins nucleares dos átomos ^{1}H e ^{13}C da molécula de clorofórmio. A computação quântica por RMN é um assunto vasto e com ampla produção bibliográfica. Assim sendo, procuramos focalizar na descrição apenas dos conceitos fundamentais e dos métodos relevantes para o entendimento deste trabalho. Revisões detalhadas sobre computação quântica por RMN podem ser encontradas no livro de Oliveira *et al.* [74], nas teses de Vandersypen [148] e Steffen [149], e também nos artigos de revisão [150–152]. Um tratamento mais completo sobre a RMN pode ser obtido através dos livros [153, 154].

4.1.1 Q-bits

Os q-bits em RMN são spins nucleares de átomos em uma única molécula imersa em um campo magnético constante. Geralmente são usados spins 1/2, embora implementações com spins de maior valor também sejam possíveis [155–157]. Um único núcleo de spin 1/2 submetido a um campo magnético B_0 possui dois níveis (estados) de energia [154]: $E_1 = +\hbar\gamma B_0/2$ e $E_0 = -\hbar\gamma B_0/2$, onde $\omega = \gamma B_0$ é a freqüência de Larmor e γ é a razão giromagnética nuclear. A interação do spin com o campo magnético é conhecida como interação Zeeman. Os dois níveis de energia do sistema são associados aos níveis

lógicos $|0\rangle$ e $|1\rangle$, como encontra-se ilustrado na figura (4.1). Assim, uma molécula que contém N spins 1/2 acoplados constitui um processador quântico de N q-bits.

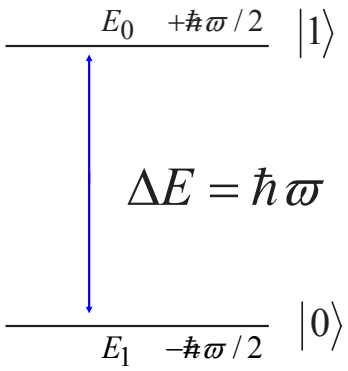


Figura 4.1: Níveis de energia de um spin 1/2 imerso em um campo magnético constante.

Para moléculas em solução líquida, geralmente a única interação entre os spins que é importante é a interação de troca, ou acoplamento escalar, sendo as contribuições das outras interações, tal como a interação dipolar, canceladas devido ao movimento aleatório das moléculas. A Hamiltoniana da interação escalar é dada por [74]:

$$\mathcal{H}_J = 2\pi\hbar J \frac{\vec{\sigma}_I \cdot \vec{\sigma}_S}{4} = 2\pi\hbar J \frac{\sigma_I^x\sigma_S^x + \sigma_I^y\sigma_S^y + \sigma_I^z\sigma_S^z}{4}, \tag{4.1}$$

onde J é a constante de acoplamento escalar entre o par de spins I e S. Quando $|\omega_I - \omega_S| \gg 2\pi|J|$, uma condição facilmente satisfeita por moléculas heteronucleares e por alguns sistema homonucleares, a Hamiltoniana (4.1) pode ser escrita em uma forma mais simples: [74]:

$$\mathcal{H}_J = 2\pi\hbar J \frac{\sigma_I^z\sigma_S^z}{4}. \tag{4.2}$$

O sistema experimental empregado nesta tese é compreendido pelos spins nucleares ^{1}H e ^{13}C na molécula de clorofórmio ($CHCl_3$) em solução líquida. A Hamiltoniana total deste sistema compreende a parte da interação escalar e da interação Zeeman.

$$\mathcal{H}_0 = -\hbar\omega_I \frac{\sigma_I^z}{2} - \hbar\omega_S \frac{\sigma_S^z}{2} + 2\pi\hbar J \frac{\sigma_I^z\sigma_S^z}{4}, \tag{4.3}$$

onde o acoplamento J observado é de aproximadamente 216 Hz e os índices I e S representam os átomos de hidrogênio e carbono, respectivamente. Os autoestados e autovalores da Hamiltoniana (4.3) são facilmente obtidos a partir da forma matricial dos operadores

σ_I^z e σ_S^z [158]:

$$\sigma_I^z = \sigma^z \otimes \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_S^z = \mathbb{1} \otimes \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

onde $\mathbb{1}$ é o operador identidade. Como estes operadores comutam entre si e atuam em espaços vetoriais diferentes, os autoestados da Hamiltoniana acima são simplesmente o produto tensorial dos autoestados de cada spin. Em RMN, os autoestados são escritos como $|m_I, m_S\rangle$, onde $m_I = \pm 1/2$ e $m_S = \pm 1/2$ são os autovalores de σ_I^z e σ_S^z, respectivamente. Aqui usaremos a notação mais conveniente para a computação onde o estado $|-1/2\rangle$ é denotado por $|1\rangle$ e o estado $|+1/2\rangle$ é denotado por $|0\rangle$. Um diagrama com os níveis de energia do clorofórmio é apresentado na figura (4.2).

As transições entre os níveis de energia são permitidas de acordo com as regras de seleção [158], ou seja, apenas aquelas que satisfazem à relação $\Delta m_{I,S} = \pm 1$ são permitidas. Portanto, o espectro de RMN do clorofórmio possui quatro picos, localizados nas freqüências $\omega_I/2\pi \pm J/2$ e $\omega_S/2\pi \pm J/2$, como mostra a figura (4.2). As linhas são relativas às transições $|00\rangle \Leftrightarrow |01\rangle$, $|10\rangle \Leftrightarrow |11\rangle$, $|00\rangle \Leftrightarrow |10\rangle$ e $|01\rangle \Leftrightarrow |11\rangle$.

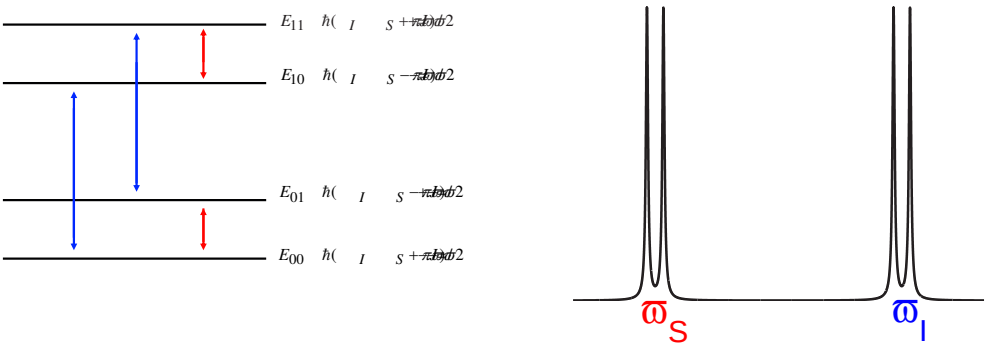


Figura 4.2: Níveis de energia e o espectro de RMN do clorofórmio.

4.1.2 Portas lógicas quânticas

Transições entre os níveis de energia definidos pela Hamiltoniana (4.3) podem ser induzidos pela aplicação de uma onda eletromagnética com freqüência, duração e fase apropriadas. Para spins nucleares em um campo estático da ordem de poucos Teslas, a

separação entre os níveis de energia é da ordem de 10^{-9} eV a 10^{-6} eV, o que significa que as transições são induzidas por ondas de radiofreqüência (RF), cujas freqüências são da ordem de megahertz. Pulsos de RF e evoluções livres governadas pela Hamiltoniana (4.2) são os ingredientes básicos na construção de portas lógicas. Na seção 3.1.2 introduzimos dois tipos de portas quânticas: as portas de um q-bit e as portas controladas. As primeiras são feitas com pulsos de RF ao passo que as portas controladas são combinações de pulsos e evoluções livres.

Portas de um q-bit são implementadas a partir de rotações definidas por:

$$R(\hat{n},\theta) = exp\left(-\frac{i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}{2}\right), \tag{4.5}$$

onde $\hat{n}$ é um vetor especificando o eixo de rotação e θ é o ângulo de rotação. Qualquer transformação unitária V de um q-bit pode ser realizada usando uma seqüência de rotações em torno de apenas dois eixos. De acordo com o teorema de Bloch [35]: para qualquer operação unitária V de um q-bit, existem quatro números reais α, β, γ e δ tais que

$$V = e^{i\alpha}R(x,\beta)R(y,\gamma)R(x,\delta). \tag{4.6}$$

Rotações de um q-bit são implementadas diretamente por pulsos de RF. Sob a aplicação de um pulso de RF, a evolução dos spins é melhor descrita no sistema de referencial girante, o qual consiste de um sistema de coordenadas que gira com freqüência angular ω^{rf} igual a freqüência da RF aplicada. Usualmente ω^{rf} é igual à freqüência de Larmor (ω) do spin, neste caso dizemos que o pulso é aplicado na ressonância. Se $\omega_{ref} \neq \omega$, então dizemos que o pulso é aplicado fora da ressonância. Quando o pulso é aplicado na ressonância de um spin, visto do referencial girante, este evolui segundo a transformação (ver Apêndice B):

$$R(\hat{n}_\phi,\theta) = \exp\left[i\omega_1 t_{pw}\frac{(cos(\phi)\sigma^x - sin(\phi)\sigma^y)}{2}\right], \tag{4.7}$$

onde ϕ é a fase, ω_1 é a amplitude e t_{pw} é o tempo de duração do pulso. Comparando (4.5) com (4.7), podemos ver que $R(\hat{n}_\phi,\theta)$ descreve uma rotação em torno de um eixo contido no plano xy e determinado pelo ângulo ϕ, sendo o ângulo de rotação dado por $\theta = \omega_1 t_{pw}$. Portanto, um pulso com fase $\phi = \pi$ e $\omega_1 t_{pw} = \pi/2$ vai implementar uma rotação de $\pi/2$ em torno do eixo x. Um pulso similar com o dobro da duração implementa uma rotação de π. Trocando a fase para $\phi = \pi/2$, as rotações ocorrerão em torno de y. Para $\phi = 0$,

rotações em torno de $-x$ são obtidas e para $\phi = 3\pi/2$ as rotações são ao redor de $-y$.

A determinação do tempo de pulso necessário para implementar a rotação desejada é feita na prática através de um processo de calibração. A calibração dos pulsos é feita monitorando-se as intensidades das linhas de cada spin, com o tempo de pulso fixo (tipicamente da ordem de microsegundos) variando a potência aplicada. Como a RMN é sensível a magnetização no plano xy, a condição de máximo, ou saturação, desta linha, corresponde à um pulso de $\pi/2$. De agora em diante, denotaremos um pulso que implementa a rotação $R(\hat{n}_\phi, \theta)$ no spin i por $(\theta)_i^\phi$.

A possibilidade de implementar rotações em torno de x e y é suficiente para construir qualquer porta de um q-bit. Desta maneira, a partir de (4.6) podemos construir seqüências para implementar qualquer operação lógica de um q-bit. Seqüências de pulsos utilizadas para realizar as principais operações de um q-bit são mostradas no Apêndice A.

Operações de dois q-bits são geradas combinando a evolução descrita pela Hamiltoniana de interação entre spins e pulsos de RF. A interação entre o spin nuclear do carbono e do hidrogênio no clorofórmio é governada pela Hamiltoniana (4.2), de onde podemos obter o operador evolução temporal no referencial girante, que é dado por:

$$U_J(t) = e^{-i\mathcal{H}_J t/\hbar} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi Jt/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{+i\pi Jt/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+i\pi Jt/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi Jt/2} \end{pmatrix}. \tag{4.8}$$

A porta S controlada (U_{SC}), por exemplo, pode ser construída, a menos de uma fase global, com duas rotações combinadas com uma evolução livre com $t = J/2$. Assim temos:

$$U_{CS} = \sqrt{-i} R_I(z, -\pi/2) R_S(z, -\pi/2) U_J(1/2J) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.9}$$

Além da porta S controlada, muitas outras portas controladas podem ser construídas e várias seqüências diferentes podem ser criadas para implementar a mesma operação lógica. No Apêndice A mostramos algumas seqüências utilizadas na implementação das

principais portas controladas.

4.1.3 Estados pseudo puros

Os experimentos de computação quântica por RMN são implementados em uma amostra macroscópica contendo um grande número de moléculas. A temperatura ambiente, o *ensemble* de spins em equilíbrio térmico é descrito pela matriz densidade

$$\rho_{eq} = \frac{e^{-\mathcal{H}\beta}}{Tr(e^{-\mathcal{H}\beta})} \approx \frac{(\mathbb{1} - \beta\mathcal{H})}{2^N} \approx \frac{\mathbb{1}}{2^N} - \frac{\beta}{2^N}\Delta\rho, \tag{4.10}$$

onde β é o fator de Boltzmann e $\mathcal{H}$ é a Hamiltoniana interna do sistema de spins. Note que $Tr(\rho_{eq}) = 1$ e $Tr(\Delta\rho) = 0$. A parte observada em RMN é simplesmente $\Delta\rho$.

Para implementar computação quântica com RMN, o estado inicial é preparado, a partir do equilíbrio térmico, em um estado misto chamado estado pseudo puro (PPS – do inglês *Pseudo Pure State*) [159–161]:

$$\rho_{pps} = \frac{(1-\epsilon)}{2^N}\mathbb{1} + \epsilon|\psi\rangle\langle\psi|, \tag{4.11}$$

onde ϵ é a polarização. O segundo termo do lado direito da equação (4.11) representa um estado puro e, sob operações unitárias, ele se transforma como tal. Desta forma, um estado PPS é uma mistura estatística. Porém, este se comporta como um estado puro. A única diferença entre o sinal de RMN de um estado pseudo puro e de um estado puro ($\epsilon = 1$) é a intensidade do sinal.

No regime de altas temperaturas, o estado de equilíbrio dos spins do clorofórmio é dado por

$$\rho = \frac{e^{-\mathcal{H}_0\beta}}{Tr(e^{-\mathcal{H}_0\beta})} \sim \frac{1}{4}\mathbb{1} + \alpha\left(\frac{1}{2}\sigma_S^z + \frac{\gamma_H}{2\gamma_C}\sigma_I^z\right) \tag{4.12}$$

onde o valor relativo das razões giromagnéticas do carbono e hidrogênio é $\gamma_H/\gamma_C \sim 4$ e $\alpha = \hbar\omega_S\beta/4 \sim 10^{-6}$. Existem três técnicas usualmente empregadas para a criação de estados pseudo puros [74]: a média temporal, a média espacial e a indexação lógica. Neste trabalho usamos a técnica de média espacial, que usa gradientes de campo magnético. Para criar estados pseudo puros no clorofórmio, utilizamos a seqüência de pulsos desenvolvida por Pravia *et al.* [162]. A partir do estado de equilíbrio térmico, a aplicação da

seqüência

$$(\pi/2)^{x}_{I,S} - U_J(1/4J) - (\pi/2)^{y}_{I,S} - U_J(1/4J) - (\pi/2)^{-x}_{I,S} - G_z$$
$$-(\pi/4)^{y}_{I,S} - U_J(1/2J) - (\pi/6)^{x}_{I,S} - G_z \tag{4.13}$$

resulta no estado pseudo puro

$$\rho_{pps} = \frac{(1-\epsilon)}{4}\mathbb{1} + \epsilon|00\rangle\langle 00|, \tag{4.14}$$

onde $\epsilon = \alpha\sqrt{6}(\gamma_H/\gamma_C + 1)/16 \sim 0.75\alpha$ e G_z representa a aplicação de um gradiente de campo magnético. A seqüência acima deve ser lida da esquerda para a direita. A operação G_z cria um gradiente de campo magnético ao longo da amostra, com isso, spins em moléculas separadas espacialmente irão possuir freqüencias de Larmor diferentes. O efeito macroscópico da aplicação do gradiente consiste em anular a magnetização no plano xy pois as projeções dos spins se distribuem aleatoriamente neste plano. Na matriz densidade, o efeito do gradiente de campo magnético se reflete nos elementos fora da diagonal, que podem ser "destruídos"com a aplicação de um gradiente adequado.

A partir de (4.14), qualquer outro estado pseudo puro pode ser criado através da aplicação de operações unitárias. Por exemplo, estados pseudo emaranhados podem ser criados através da seqüência [162]

$$(\pi/2)^{-x}_{I} - (\pi/2)^{y}_{S} - U_J(1/2J) - U(\pi/2)^{-y}_{S} - (\pi/2)^{x}_{I}. \tag{4.15}$$

Esta seqüência é equivalente ao circuito Gerador de EPR, introduzido no capítulo anterior.

4.1.4 Separabilidade dos estados pseudo puros

A matriz densidade (4.11) pode representar um *ensemble* de spins em que apenas uma fração ϵ do sistema está no estado puro $|\psi\rangle$ enquanto o resto está em uma mistura estatística máxima. Entretanto esta não é a única interpretação possível. Braunstein *et al.* [163] demonstraram que qualquer matriz de N q-bits na forma (4.11) pode ser decomposta em um *ensemble* separável se $\epsilon \leq 1/(1 + 2^{2N-1})$, mesmo quando $|\psi\rangle$ é emaranhado. Braunstein e colaboradores também demonstraram que um estado pseudo emaranhado é de fato emaranhado se $\epsilon > 1/(1 + 2^{N/2})$. É um problema em aberto se existe ou não emaranhamento no intervalo $1/(1 + 2^{2N-1}) \leq \epsilon < 1/(1 + 2^{N/2})$. A temperatura ambiente, ϵ é muito pequeno e a matriz densidade é sempre separável para N menor

que aproximadamente doze q-bits, situação que a maioria dos experimentos de RMN se encontram.

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, uma vez que estes sempre se comportam como um estado puro. O ponto crucial apontado por Linden e Popescu [113], é que a separabilidade dos estados pseudo puros não proporciona ganho exponencial de velocidade de processamento. Considere que a implementação de um dado algoritmo em um computador quântico de RMN resulta no estado:

$$\rho_{pps} = \frac{(1-\epsilon)}{2^N}\mathbb{1} + \epsilon|\psi_f\rangle\langle\psi_f|, \tag{4.16}$$

onde $|\psi_f\rangle$ representa a solução de um problema matemático. Neste estado, temos uma probabilidade ϵ de encontrar o computador no estado que representa a solução e uma probabilidade $(1-\epsilon)$ de encontrar o computador em uma mistura estatística completa. 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 muitas vezes para que a solução possa ser encontrada. Linden e Popescu [113] mostraram que se o estado pseudo puro for separável, então o número de repetições necessárias escalona exponencialmente.

4.1.5 Tomografia de estado quântico

O observável de RMN é a variação temporal da magnetização nuclear da amostra. O processo de detecção será explicado em mais detalhe na seção 4.1.7. Basicamente, a evolução livre dos spins provoca a variação da magnetização que induz um sinal elétrico, em uma bobina, chamado de Decaimento de Indução Livre (FID − do inglês *Free Induction Decay*). Para o spin j, o sinal de RMN pode ser expresso matematicamente por [74]:

$$Fid(t) = Tr[e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}\rho(0)e^{+i\mathcal{H}t/\hbar}(\sigma_j^x - i\sigma_j^y)/2]e^{-t/T_2}, \tag{4.17}$$

onde $\rho(0)$ representa a matriz densidade em $t = 0$, $\mathcal{H}$ é a Hamiltoniana natural do sistema e o decaimento exponencial e^{-t/T_2} é devido aos efeitos de relaxação, sendo T_2 uma cons-

tante característica do processo de relaxação, que varia para cada sistema, temperatura e também depende de como a amostra foi preparada. Substituindo a Hamiltoniana do clorofórmio (4.3) em (4.17) temos:

$$Fid(t) = \rho_{13} e^{i(\omega_I - \pi J)t} + \rho_{24} e^{i(\omega_I + \pi J)t} \quad \text{para o Hidrogênio e} \tag{4.18}$$

$$Fid(t) = \rho_{12} e^{i(\omega_S - \pi J)t} + \rho_{34} e^{i(\omega_S + \pi J)t} \quad \text{para o Carbono.} \tag{4.19}$$

Como podemos ver, o sinal resultante para cada spin corresponde a soma de dois sinais com freqüências diferentes sendo que a amplitude de cada componente é proporcional a um elemento da matriz densidade. Desta maneira, o sinal de RMN de um único experimento fornece apenas informação parcial sobre o estado do sistema. A determinação completa do estado requer a aplicação de um processo chamado de tomografia de estado quântico [161, 164–167], o qual permite determinar todos os elementos de uma matriz densidade ρ. Este método consiste em repetir o experimento várias vêzes medindo-se o mesmo estado em bases diferentes. Na prática, é mais conveniente girar os q-bits usando operações unitárias e depois medi-los em uma base fixa. É importante enfatizar que a RMN é sensível apenas à matriz de desvio $\Delta\rho$. Em um sistema de dois q-bits, as rotações utilizadas para a reconstrução da matriz de desvio são:

$$\mathbb{1}, (\pi/2)^x_S, (\pi/2)^y_S, (\pi/2)^x_I, (\pi/2)^x_{I,S}, (\pi/2)^x_I - (\pi/2)^y_S,$$
$$(\pi/2)^y_I, (\pi/2)^y_I - (\pi/2)^x_S \text{ e } (\pi/2)^y_{I,S}. \tag{4.20}$$

Para cada uma das 9 operações, se faz duas medidas: uma no carbono e outra no hidrogênio. Cada medida fornece informações sobre combinações de diferentes elementos da matriz de desvio. Como cada espectro possui 2 picos com uma parte real e outra imaginária, no final obtemos 4 x 9 x 2 = 72 equações. Podemos também adicionar mais uma equação que corresponde a condição de traço de $\Delta\rho$ igual a 0, o que resulta num total de 73 equações para 16 incógnitas. A condição de traço igual 0 e não igual a 1 se deve ao fato de estarmos lidando com matriz de desvio, que é parte observada nos experimentos de RMN.

Para se determinar os elementos da matriz de desvio, precisamos resolver um sistema de equações lineares do tipo:

$$Ax = B \tag{4.21}$$

Há certamente expressões redundantes em (4.21) , uma vez que o número de equações

é muito maior que o número de incógnitas. A maneira padrão de se lidar com o problema é usar o método de mínimo quadrados para resolver o sistema [164]. Após tal procedimento, todos os elementos de $\Delta\rho$ são determinados. No Apêndice C, apresentamos os programas, em MATLAB, utilizados para gerar e resolver o sistema de equações (4.21).

4.1.6 Relaxação

O efeito da interação de um sistema quântico com o ambiente pode ser descrito matematicamente pelo formalismo de operador soma [35]:

$$\rho \rightarrow \sum_k E_k \rho E_k^\dagger \tag{4.22}$$

onde E_k são operadores conhecidos como operadores de Krauss e $\sum_k E_k^\dagger E_k = \mathbb{1}$. Este formalismo compreende todos os processos físicos que possam atuar em um sistema quântico, incluindo tanto processos unitários como não unitários. Note que no caso de processos unitários há apenas um termo na equação (4.22), $E_1 = U$.

Para descrever a relaxação de spins isolados, há dois mecanismos importantes: A atenuação de amplitude e a atenuação de fase. A atenuação de amplitude descreve o processo de relaxação causado pela troca de energia entre o sistema quântico e o ambiente. Em RMN, a atenuação de amplitude está associada ao processo de relaxação devido ao acoplamento dos spins com a rede, que é todo ambiente em torno dos spins e que se encontra freqüentemente a temperatura mais elevada. A atenuação de amplitude é descrita pelos operadores de atenuação de amplitudes generalizada (AAG) [35]:

$$\begin{aligned} E_1 &= \sqrt{p}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\gamma} \end{pmatrix}, \quad E_2 = \sqrt{p}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\gamma} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ E_3 &= \sqrt{1-p}\begin{pmatrix} \sqrt{1-\gamma} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ e } \quad E_4 = \sqrt{1-p}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{\gamma} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{4.23}$$

Fisicamente, os operadores (4.23) descrevem um processo no qual um q-bit no estado excitado decai para o estado fundamental com probabilidade γp e é levado do estado fundamental ao estado excitado com probabilidade $(1-\gamma p)$ [148]. O parâmetro p depende da temperatura do ambiente e da diferença de energia entre o estado fundamental e o excitado. Em muitos sistemas, γ é uma função do tempo na forma $\gamma = 1 - e^{-t/T_1}$, onde T_1 é uma constante de tempo característica do sistema.

A atenuação de fase descreve um processo de relaxação sem troca de energia com o ambiente. Em RMN, a atenuação de fase está associada ao processo de perda de coerência dos spins devido a flutuações locais do campo magnético, que podem ser causadas tanto por outros spins como por inomogeneidade do campo B_0. O processo de atenuação de fase é descrito pelos operadores de atenuação de fase (AF) [35]:

$$E_1 = \sqrt{\lambda}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad E_2 = \sqrt{1-\lambda}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.24}$$

Fisicamente, os operadores (4.24) descrevem um processo no qual a fase relativa entre $|0\rangle$ e $|1\rangle$ é invertida ($\phi \rightarrow \phi+\pi$) com probabilidade $1-\lambda$ [148]. Em muitos sistemas temos que $\lambda = (1+e^{-t/T_2})/2$, onde novamente T_2 é uma constante de tempo característica. Na literatura de RMN, T_1 e T_2 são chamados respectivamente de tempo de relaxação spin-rede e tempo de relaxação spin-spin.

Os operadores AF e AAG descrevem a relaxação de spins que não interagem entre si. No entanto, para spins acoplados existem outros processos que devem ser levados em consideração. Uma descrição completa do acoplamento de um sistema de RMN com o ambiente é extremamente complexo [154]. Entretanto, é possível obter um modelo aproximado simples usando apenas os processos de atenuação de fase e de amplitude. Este modelo, desenvolvido em [96], supõe que o sistema evolui sob uma Hamiltoniana interna $\mathcal{H}$ durante um tempo t_d e que, durante este tempo, sofre também a atuação do ambiente. Para simular a evolução do sistema, primeiramente a evolução unitária $U = e^{-i\mathcal{H}t_d/\hbar}$ é aplicada, posteriormente os operadores AAG são aplicados sobre o primeiro spin, aplicados sobre o segundo spin e assim por diante. Por fim os operadores AF são aplicados em sequência sobre cada spin, sendo os parâmetros T_1 e T_2 determinados experimentalmente. Este modelo tem sido utilizado com sucesso em alguns experimentos de computação quântica por RMN [96, 111]. Neste trabalho usamos o método para acompanhar os efeitos da relaxação sobre o experimento.

4.1.7 Aparato experimental

Na prática, operações sobre o sistema de spins são realizadas em espectrômetros de RMN. Nesta seção descrevemos os princípios básicos de um espectrômetro de RMN, para uma descrição mais detalhada ver [168]. A figura (4.3) mostra de forma esquemática a arquitetura básica de um espectrômetro de RMN. O transmissor é a parte do espectrômetro

responsável pela geração da RF usada para excitar a amostra. Dentro do transmissor um sinal elétrico de freqüência e fase bem definidas é gerado pelo sintetizador e modulado por uma função retangular ou por uma outra função especial, tal como uma gaussiana ou uma função sinc $(sen(x)/x)$, produzindo assim pulsos que realizam as operações lógicas. Parte do sinal gerado pelo transmissor é enviado a um bobina. Ao passar pela bobina o sinal elétrico gera uma onda eletromagnética que excita a amostra colocada no interior desta. A outra parte do sinal é usada como referência na detecção. Esta última parte é separada em duas componentes de igual amplitude, porém em quadratura, isto é, uma componente sofre o deslocamento de fase de 90^0 em relação a outra.

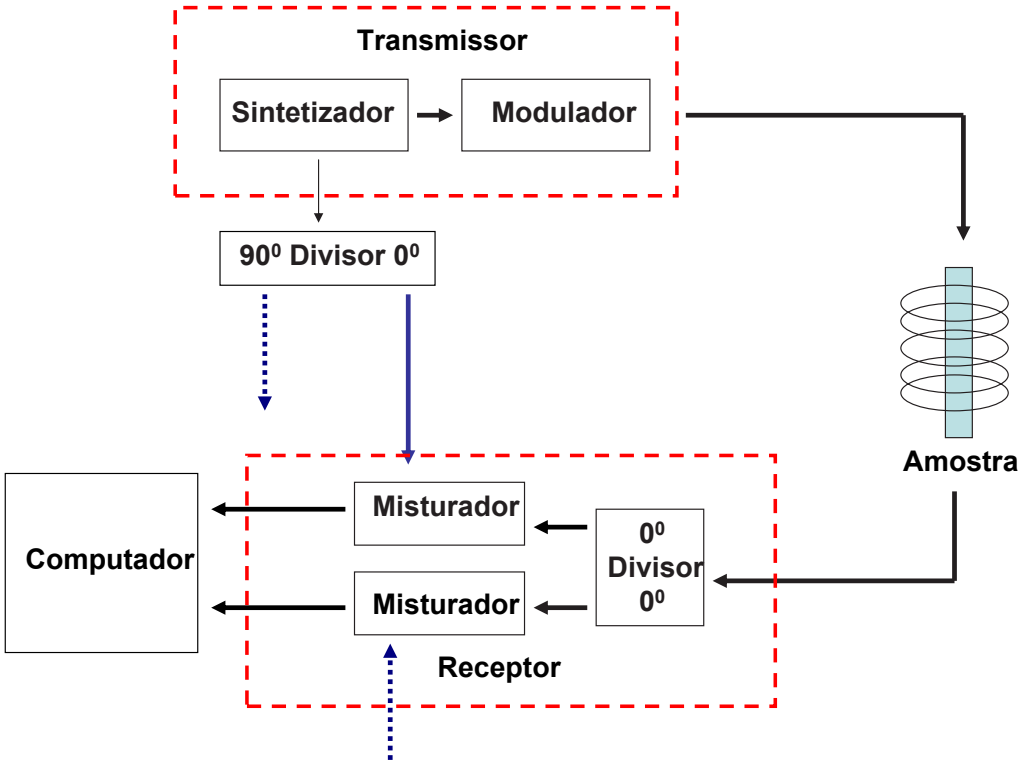


Figura 4.3: Arquitetura básica de um espectrômetro de RMN.

Após a aplicação da seqüência de pulsos requerida pelo experimento, a variação da magnetização da amostra é detectada na mesma bobina usada para aplicar os pulsos de RF. O sinal detectado é então mandado para a parte do espectrômetro chamada de receptor. No receptor, o sinal detectado é dividido em duas componentes com mesma fase e amplitude. Ambas as componentes são misturadas com o sinal de referência, originado

no receptor. A mistura dos sinais é necessária para transformar o sinal observado na faixa de MHz em um sinal na faixa de áudio (20Hz a 20KHz), que pode ser mais facilmente digitalizado. A freqüência do sinal resultante será dada pela diferença entre a freqüência do sinal detectado e a freqüência do sinal de referência. O sinal resultante está na mesma freqüência que é observada no referencial girante, portanto a etapa de misturar o sinal detectado com o sinal de referência é a maneira como a transformação matemática de mudança de referencial é realizada, eletronicamente, no laboratório. Os sinais são então digitalizados e guardados na forma de uma função complexa:

$$S(t) = A[cos(\omega^{rf}t + \phi) + isin(\omega^{rf}t + \phi)]. \tag{4.25}$$

Este sinal é conhecido como FID complexo e o procedimento de detecção, explicado acima, é chamado de detecção em quadratura [169–171]. A necessidade da detecção em quadratura está relacionada com a transformada de Fourier. Se um sinal de RMN for detectado no modo simples ($S(t) = Acos(\omega^{rf}t + \phi)$), a transformada de Fourier de tal sinal produziria dois picos simétricos relacionados com a mesma ressonância, duplicando assim o espectro. A maneira simples de contornar o problema é utilizando a detecção em quadratura, uma vez que a transformada de Fourier do sinal complexo gera apenas um pico para cada freqüência de ressonância.

4.2 Resultados

Nesta seção, são apresentados os resultados teóricos e experimentais referentes à primeira parte do trabalho desenvolvido nesta tese. Primeiramente, explicaremos o protocolo para simular as desigualdades de Bell e posteriormente apresentaremos o modelo de variáveis ocultas desenvolvido por Menicucci e Caves [10]. Os resultados referentes ao experimento de simulação da violação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt são apresentados na última parte desta seção.

4.2.1 Método para simular desigualdades de Bell com RMN

Neste trabalho, trataremos da generalização das desigualdades de Bell para N q-bits desenvolvida em [65–67]. Estas desigualdades envolvem medidas de um conjunto de funções de correlação, em que N observadores podem escolher um dentre M observáveis,

cujas medidas somente podem fornecer dois valores, por exemplo $s = 0$ ou $s = 1$. Desta forma, M^N funções de correlação, representadas por $E(n_1, \cdots, n_N)$, podem ser construídas, onde o índice n_i pode ser $n_i = 1, \cdots, M$ e denota a configuração do i-ésimo observador. No caso da RMN, estes observáveis são projeções de spins nucleares 1/2 em uma direção particular rotulada por n_i. Considerando as medidas destes observáveis, é possível construir diferentes desigualdades de Bell, onde cada uma delas exibe contradições com a hipótese do realismo local para alguns estados emaranhados.

Uma expressão geral para as desigualdades de Bell pode ser escrita como [67]:

$$-L \leq \sum_{n_1,\cdots,n_N=1}^{M} C(n_1, \cdots, n_N) E(n_1, \cdots, n_N) \leq +L, \tag{4.26}$$

onde $C(n_1, \cdots, n_N)$ são coeficientes reais, L é algum limite imposto pelo realismo local e as funções de correlação são dadas por:

$$E(n_1, \cdots, n_N) = \sum_{s_1,\cdots,s_N=\pm 1} (\prod_{j}^{N} s_j) P(s_1, \cdots, s_N), \tag{4.27}$$

sendo $P(s_1, \cdots, s_N)$ a probabilidade do primeiro observador obter o resultado s_1, o segundo s_2, e assim por diante. Em um experimento padrão, um conjunto de N partículas correlacionadas são preparadas em um estado puro, e suas projeções sobre M direções diferentes são medidas por observadores diferentes. Após um grande número de experimentos, os observadores comparam seus resultados afim de obter as probabilidades mostradas em (4.27) e verificar se a desigualdade (4.26) foi violada.

Para medir a projeção $\vec{r}\cdot\vec{\sigma}$ do spin sobre uma direção arbitrária $\vec{r} = (cos(\phi)sin(\theta), sin(\phi)$ $sin(\theta), cos(\theta))$, transformações unitárias podem ser usadas para girar os autovetores do operador unitário $\vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ sobre a base computacional. Como $U^\dagger(\vec{r})\sigma^z U(\vec{r}) = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ para $U(\vec{r}) = R(y, -\theta)R(z, -\phi)$, aplicando a transformação $U(\vec{r})$ apropriada sobre cada q-bit, temos:

$$\begin{aligned} E(n_1, \cdots, n_N) &= Tr(\rho_{pps} \vec{r}_1 \cdot \vec{\sigma} \otimes \ldots \otimes \vec{r}_N \cdot \vec{\sigma}) \\ &= Tr(\rho' \sigma^z \otimes \ldots \otimes \sigma^z), \end{aligned} \tag{4.28}$$

onde $\rho' = U(\vec{r}_1) \otimes \cdots \otimes U(\vec{r}_N)\rho_{pps} U^\dagger(\vec{r}_N) \otimes \cdots \otimes U^\dagger(\vec{r}_1)$. A equação acima implica que uma medida de $E(n_1, \cdots, n_N)$ pode ser realizada girando cada q-bit por uma rotação apropriada e medindo todos eles na base computacional. A medida projetiva na base

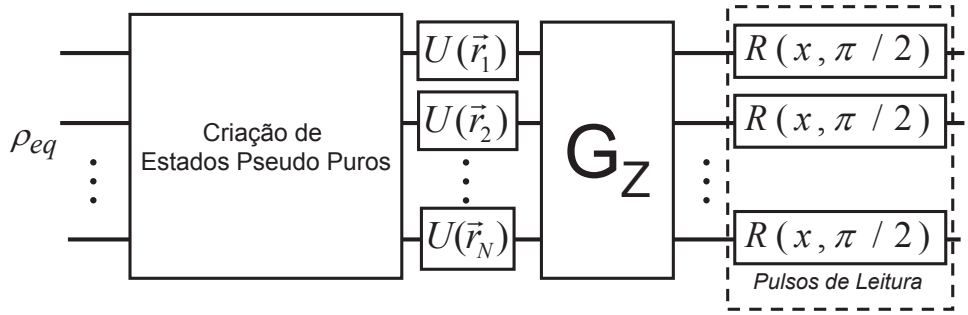


Figura 4.4: Circuito quântico para simular a função de correlação (4.27).

computacional pode ser emulada pela aplicação de um gradiente de campo magnético, que destrói os elementos de matrizes fora da diagonal [162]. Com isso, a matriz densidade do sistema se torna diagonal, como descrito na equação (4.29).

$$\rho' = \frac{(1-\epsilon)}{2^N}\mathbb{1} + \epsilon \begin{bmatrix} P_{0\cdots0} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & P_{1\cdots1} \end{bmatrix} \tag{4.29}$$

As populações, que são os elementos da diagonal, do segundo termo de (4.29) representam as probabilidades do sistema ser encontrado em um dos 2^N níveis de energia, após as rotações serem aplicadas. Além disso, elas também podem ser identificadas como sendo as probabilidades $P(s_1, \cdots, s_N)$ mostradas em (4.27). Tais populações, podem ser obtidas a partir do sinal de RMN após a aplicação de pulsos de leitura em cada spin. O sinal detectado é a magnetização média da amostra, que é proporcional à diferença de populações [74, 153]. O sinal adquirido é processado e normalizado pelo sinal de um estado de referência. Tal normalização permite a comparação entre o experimento e os resultados teóricos. O esquema, desenvolvido neste trabalho, utilizado para medir as funções de correlação é mostrado na figura (4.4). O circuito deve ser aplicado para cada função de correlação que aparece na equação(4.26).

É importante enfatizar que os q-bits em RMN são spins nucleares de átomos em uma molécula, separados por poucos angstrons. Portanto, um experimento de RMN é inerentemente local e não pode ser usado para provar efeitos não-locais. Além disso, a maioria dos experimentos de RMN são feitos a temperatura ambiente utilizando-se estados pseudo puros cujas matrizes densidade não são emaranhadas para $\epsilon \leq 1/(1+2^{2N-1})$,

como demonstrado por Braunstein *et al.* [163]. Portanto, este trabalho não oferece um procedimento experimental para provar efeitos não-locais e nem detectar emaranhamento em experimentos de RMN a temperatura ambiente. Entretanto, este trabalho pode ser usado para simular testes de diferentes desigualdades de Bell. A comparação entre o nosso experimento e um experimento de ótica mostra a fidelidade da simulação, como será discutido mais adiante. Além disso, contradições entre o realismo local e a teoria quântica poderiam ser observadas se o mesmo experimento for realizado em um *ensemble* de spins altamente polarizados, onde estados verdadeiramente emaranhados podem ser criados. Um sistema altamente polarizado em RMN já foi alcançado com ajuda do bombeamento ótico [172].

4.2.2 Modelo de variáveis ocultas para RMN

Apesar dos estados pseudo puros com $\epsilon \leq 1/(1+2^{2N-1})$ poderem ser utilizados para implementar qualquer algoritmo quântico, eles são classicamente correlacionados e portanto podem ter uma descrição realística-local. A primeira tentativa de se construir um modelo explícito de variáveis ocultas para a RMN é atribuído a Schack e Caves [173]. Entretanto o modelo criado por eles somente foi capaz de descrever a evolução dos spins sob operações separáveis[1]. Posteriormente, Menicucci e Caves [10] desenvolveram um modelo capaz de descrever a dinâmica da RMN para qualquer evolução.

O modelo se baseia no fato de que qualquer matriz densidade ρ de N q-bits pode ser associada a uma quase-distribuição

$$w_\rho(\tilde{n}) = Tr(\rho Q(\tilde{n})), \tag{4.30}$$

onde $\sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) = 1$, $\tilde{n} = (\vec{n}_1, \cdots, \vec{n}_N)$ é um conjunto de vetores tridimensionais e

$$Q(\tilde{n}) = \frac{1}{\mathcal{N}^N}(\mathbb{1} + 3\vec{n}_1 \cdot \vec{\sigma}) \otimes \cdots \otimes (\mathbb{1} + 3\vec{n}_N \cdot \vec{\sigma}). \tag{4.31}$$

Os vetores unitários $\vec{n}$ podem apontar em $\mathcal{N}$ direções diferentes satisfazendo as seguintes relações:

$$\sum n_j = 0 \qquad \text{e} \tag{4.32}$$

$$\tfrac{1}{\mathcal{N}} \sum n_j n_k = \tfrac{1}{3}\delta_{jk}, \tag{4.33}$$

[1] Operações separáveis são operações unitárias U que podem ser escritas como $U = U_1 \otimes U_2 \otimes \cdots \otimes U_N$, onde U_i atua somente sobre o i-ésimo q-bit.

onde o somatório é sobre todas as possíveis direções e os subscritos, apenas em (4.32) e (4.33), indicam as componentes de $\vec{n}$. Exemplos de vetores que satisfazem tais relações são os vértices de um tetraedo: $(+1,+1,+1)/\sqrt{3}$, $(-1,-1,+1)/\sqrt{3}$, $(-1,+1,-1)/\sqrt{3}$ e $(+1,-1,-1)/\sqrt{3}$.

Em termos de $w_\rho(\tilde{n})$, a matriz densidade é dada por:

$$\rho = \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) |\tilde{n}\rangle\langle\tilde{n}|, \tag{4.34}$$

onde $|\tilde{n}\rangle\langle\tilde{n}| = |\vec{n}_1\rangle\langle\vec{n}_1| \otimes \cdots \otimes |\vec{n}_N\rangle\langle\vec{n}_N|$ e $|\vec{n}\rangle\langle\vec{n}| = (\mathbb{1} + \vec{n}\cdot\vec{\sigma})/2$.

Sob a ação de um elemento de operação E_k, a matriz densidade de um sistema quântico genérico evolui de acordo com

$$\rho' = \sum_{\tilde{n}} w_{\rho'}(\tilde{n}') |\tilde{n}'\rangle\langle\tilde{n}'| = E_k \rho E_k^\dagger \tag{4.35}$$

e a quase-distribuição evolui de acordo com

$$w_{\rho'}(\tilde{n}') = \sum_{\tilde{n}} T^{E_k}_{\tilde{n}'\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}), \tag{4.36}$$

onde os elementos da matriz T^{E_k} são $T^{E_k}_{\tilde{n}'\tilde{n}} = \langle\tilde{n}|E_k^\dagger Q(\tilde{n}') E_k|\tilde{n}\rangle$.

Em termos de $w_\rho(\tilde{n})$, o valor esperado dos observáveis de RMN, $C(\tilde{a}) = \langle\vec{a}_1\cdot\vec{\sigma}\otimes\cdots\otimes\vec{a}_N\cdot\vec{\sigma}\rangle$, tomam a forma:

$$C(\tilde{a}) = \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n})(\vec{a}_1\cdot\vec{n}_1)\cdots(\vec{a}_N\cdot\vec{n}_N), \tag{4.37}$$

onde $\tilde{a} = (\vec{a}_1, \cdots, \vec{a}_N)$ é um conjunto de vetores que definem a componente da magnetização medida para cada spin.

Se a quase-distribuição $w_\rho(\tilde{n})$ for sempre não negativa ($w_\rho(\tilde{n}) \geq 0$), então ρ é certamente separável e a equação (4.34) fornece uma decomposição explicita de ρ em termos de produtos das matrizes densidade de cada spin. Neste caso o *ensemble* de spins pode ser interpretado como sendo um conjunto de pequenos ímãs clássicos, onde o momento magnético do primeiro spin está orientado na direção $\vec{n}_1$, o momento do segundo spin está orientado na direção $\vec{n}_2$ e assim por diante. A probabilidade de o *ensemble* ser encontrado na configuração $\tilde{n} = (\vec{n}_1, \cdots, \vec{n}_N)$ é dada por $w_\rho(\tilde{n})$. Assim, o modelo de variáveis ocultas para RMN se resume em modelar corretamente a dinâmica de $w_\rho(\tilde{n})$. Note que $w_\rho(\tilde{n})$ deve ser sempre não negativa para ser interpretada como uma distribuição de probabi-

lidade, tal condição é sempre satisfeita se $\epsilon \leq 1/(1+2^{2N-1})$. Se $w_\rho(\tilde{n})$ assumir valores negativos, ρ não é mais separável e o modelo de Menicucci e Caves falha.

No cenário apresentado acima, o modelo mais simples de variáveis ocultas para RMN pode ser construído da seguinte maneira: considere as variáveis ocultas como sendo $\lambda = (\tilde{n}, \tilde{\Lambda})$, onde $\tilde{\Lambda} = (\Lambda_1, \cdots, \Lambda_N)$ e $-1 \leq \Lambda_r \leq +1$. A distribuição de λ é dada por:

$$P(\lambda) = P(\tilde{n}, \tilde{\Lambda}) = \frac{1}{2^N} w_\rho(\tilde{n}). \tag{4.38}$$

Postulando que o resultado de uma medida sobre o spin r é dado pela função

$$A_r(\vec{a}_r, \lambda) = A(\vec{a}_r, \Lambda_r, \vec{n}_r) = \begin{cases} +1 & \text{Se} \quad \Lambda_r \geq -\vec{a}_r \cdot \vec{n}_r \\ -1 & \text{Se} \quad \Lambda_r < -\vec{a}_r \cdot \vec{n}_r \end{cases}, \tag{4.39}$$

o valor médio $C(\tilde{a})$ é dado por:

$$\begin{aligned} C(\tilde{a}) &= \int P(\lambda) \prod_{j=1}^{N} A_j(\vec{a}_j, \lambda) d\lambda \\ &= \int \frac{1}{2^N} \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) \prod_{j=1}^{N} A_j(\vec{a}_j, \Lambda_j, \vec{n}_j) d\tilde{\Lambda} \\ &= \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) \prod_{j=1}^{N} \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} A_j(\vec{a}_j, \Lambda_j, \vec{n}_j) d\tilde{\Lambda} \\ &= \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) \prod_{j=1}^{N} \vec{a}_j \cdot \vec{n}_j. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Desta maneira, o modelo descrito acima reproduz os resultados da mecânica quântica. O modelo é local pois o resultado da medida sobre o spin r somente depende de $\vec{a}_r$, $\vec{n}_r$ e Λ_r, que são variáveis locais, ou seja, não dependem de nenhum parâmetro relacionado a outro spin. No entanto o modelo apenas descreve a previsão estatística das medidas e não diz nada sobre a dinâmica do sistema, e como conseqüência o modelo não é necessariamente realístico. A hipótese fundamental do realismo é que um sistema quântico é totalmente caracterizado a cada instante por uma distribuição de variáveis $P(\lambda)$. Após uma evolução temporal, a nova distribuição $P(\lambda')$ se relaciona com a distribuição inicial $P(\lambda)$ por:

$$P(\lambda') = \int T(\lambda', \lambda) P(\lambda) d\lambda \tag{4.41}$$

onde $T(\lambda', \lambda)$ é a transição de probabilidade devido a ação de uma operação quântica. Para $T(\lambda', \lambda)$ ser considerada uma boa matriz de transição, é preciso que ela seja sempre positiva.

No modelo proposto por Menicucci e Caves, as variáveis ocultas são $\lambda = (\bar{w}, \tilde{n}, \tilde{\Lambda})$, onde $\bar{w}$ é um vetor cujas componentes são as quase-distribuições $w_\rho(\tilde{n})$. A distribuição de probabilidade para λ é

$$P(\lambda) = \frac{1}{2^N}\delta(\bar{w} - \bar{w_\rho})w(\tilde{n}). \tag{4.42}$$

Devido a ação dos operadores de Krauss, o vetor $\bar{w}$ é atualizado segundo a transformação (4.36). A função delta em (4.42) não muda o valor de $\bar{w}$ que resulta da aplicação de (4.36). No entanto pode se mostrar que a distribuição (4.42) implica na transição de probabilidade $T(\lambda', \lambda)$ ser sempre positiva [174].

Os valores esperados previstos por este modelo clássico são dados por:

$$\begin{aligned} C(\tilde{a}) &= \int P(\lambda) \prod_{j=1}^{N} A_j(\vec{a}_j, \lambda) d\lambda \\ &= \sum_{\tilde{n}} \int \frac{1}{2^N}\delta(\bar{w} - \bar{w_\rho})w(\tilde{n}) d\bar{w} \prod_{r=1}^{N} \int_{-1}^{+1} A(\vec{a}_r, \Lambda_r, \vec{n}_r) d\Lambda_r \\ &= \sum_{\tilde{n}} w_\rho(\tilde{n}) \prod_{j=1}^{N} \vec{a}_j \cdot \vec{n}_j. \end{aligned} \tag{4.43}$$

Este modelo reproduz os resultados da mecânica quântica. Porém desta vez não apenas a estatística das medidas foi modelada mas também a dinâmica do sistema. 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 um como pequeno ímã clássico cujo momento magnético está orientado em uma direção definida.

Resumindo, o modelo funciona da seguinte maneira: dada uma matriz densidade inicial, associamos uma quase-distribuição $w_\rho(\tilde{n})$. Devido a ação dos operadores de Krauss, o vetor $\bar{w}$ é atualizado segundo a transformação (4.36). O conjunto $(\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_k)$ é sorteado para "cada molécula"e a função (4.39) é calculada para cada spin dentro da molécula. A magnetização do spin k na direção $\vec{a}_k$ será proporcional a quantidade:

$$M_k(\vec{a}_k) \propto \sum_{\tilde{n}} \int A_k(\vec{a}_k, \Lambda_k, \vec{n}_k) d\Lambda_k. \tag{4.44}$$

Para calcular o modelo, utilizamos os elementos de operação E_k como parâmetros. Simulamos cada etapa do experimento e analisamos o sinal de RMN, previsto pelo modelo, da mesma forma como os dados experimentais foram analisados. Desta maneira podemos comparar diretamente a previsão do modelo com os resultados experimentais. Os programas para simular os espectros de RMN utilizando o modelo de variáveis ocultas e a mecânica quântica podem ser encontrados no Apêndice C.

É importante ressaltar que o modelo de Menicucci e Caves não é um modelo computacionalmente eficiente pois o número de variáveis ocultas escalona exponencialmente com o tamanho do sistema. Assim, apesar do estado de um sistema de RMN a temperatura ambiente ser clássico (no sentido de que não produz emaranhamento), a dinâmica da RMN é quântica (no sentido de que não pode ser simulada eficientemente em um computador clássico). Fato que também se relaciona com o cenário montado por Milburn *et al.* [115] e discutido na seção 3.1.4, que coloca a dinâmica como a fonte do poder da computação quântica.

4.2.3 Experimento de simulação da desigualdade de CHSH

Para demonstrar nosso esquema experimentalmente, utilizamos um sistema de dois q-bits, compreendido pelos spins nucleares dos átomos ^{1}H e ^{13}C da molécula de clorofórmio ($CHCl_3$), para simular a violação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt [8] que é um caso especial de (4.26). Como explicado na seção 2.6.1, esta desigualdade envolve a medida da quantidade

$$CHSH = E(n_1, n_2) + E(n_3, n_2) + E(n_3, n_4) - E(n_1, n_4). \tag{4.45}$$

O realismo local limita $CHSH$ por $-2 \leq CHSH \leq +2$, ao passo que os limites impostos pela mecânica quântica são dados por $\pm 2\sqrt{2}$. Uma situação particularmente interessante ocorre quando os parâmetros n_1, n_2, n_3 e n_4 rotulam medidas nas direções $(0, 0, 1)$, $(sin(2\theta), 0, cos(2\theta))$, $(sin(4\theta), 0, cos(4\theta))$ e $(sin(6\theta), 0, cos(6\theta))$, respectivamente. Neste caso, a mecânica quântica prediz que $CHSH = 3cos(2\theta) - cos(6\theta)$ para o estado puro emaranhado $|\psi\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$, que resulta em violação máxima da desigualdade

de CHSH para $\theta = 22.5^0$ e $\theta = 67.5^0$.

No experimento, estados pseudo puros foram criados usando a técnica de média espacial, indroduzida na seção 4.1.3. As matrizes densidade iniciais foram reconstruídas utilizando a técnica de tomografia de estado quântico (ver seção 4.1.5) e as funções de correlações foram obtidas com o método descrito na seção 4.2.1. A amostra continha clorofórmio enriquecido com 99% de carbono 13 dissolvido em diclorometano deuterado (CD_2Cl_2), a concentração era de aproximadamente 200 mg de $CHCl_3$ por 1 mL de CD_2Cl_2. A necessidade do uso do clorofórmio enriquecido se deve ao fato de que o ^{13}C possui spin 1/2, enquanto que seu isótopo mais abundante, o ^{12}C, possui spin 0 e logo não produz um sinal de RMN.

O clorofórmio foi comprado na Cambridge Isotopes Laboratoty e na sua preparação, este foi colocado em um tubo de RMN Wilmad 537-PP com o solvente e mantido frio em um banho a -80^0C de gelo seco e metanol, para que evite umidade e também evapore. O tubo foi selado, tomando cuidado para não despejar amostra na região selada , evitando assim impurezas dentro da solução.

As primeiras tentativas de realização do experimento foram feitas na Universidade de São Paulo em Ribeirão Preto. Os resultados de tais experimentos concordavam qualitativamente com a curva $3cos(2\theta) - cos(6\theta)$, porém não concordavam quantitativamente. A tomografia de estado mostrou que os estados não estavam sendo criados corretamente devido a erros experimentais que não foram completamente identificados. O experimento final foi realizado em um espectrômetro Bruker Avance 500 MHz no laboratório da Bruker BioSpin na Alemanha. Na figura (4.5) mostramos os desvios das matrizes densidades obtidas experimentalmente ρ_{exp}, referentes aos estados pseudo puros da base computacional ($|00\rangle$, $|01\rangle$,$|10\rangle$ e $|11\rangle$). Estes estados foram criados, a partir do estado térmico de equilíbrio, usando a seqüência de pulsos (4.13). Na figura (4.6) mostramos os estados pseudo emaranhados ($|\phi^{\pm}\rangle$ e $|\psi^{\pm}\rangle$), criados aplicando a seqüência (4.15) sobre os estados pseudo puros da base computacional. Na figura (4.7) mostramos o estado pseudo puro $(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$, criado simplesmente aplicando a operação $R_I(y, \pi/2)R_S(y, \pi/2)$ sobre o estado pseudo puro $|00\rangle$. O desvio $\delta = \frac{||\rho_{exp}-\rho_{id}||_2}{||\rho_{id}||_2}$, entre a matriz experimental e a ideal ρ_{id} foram encontrados abaixo de 10% em todos os casos.

Os resultados experimentais da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt, para o estado $|\phi^+\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$, podem ser vistos na figura (4.8), onde a quantidade $CHSH$ é mostrada em função do ângulo θ. Nesta figura, comparamos

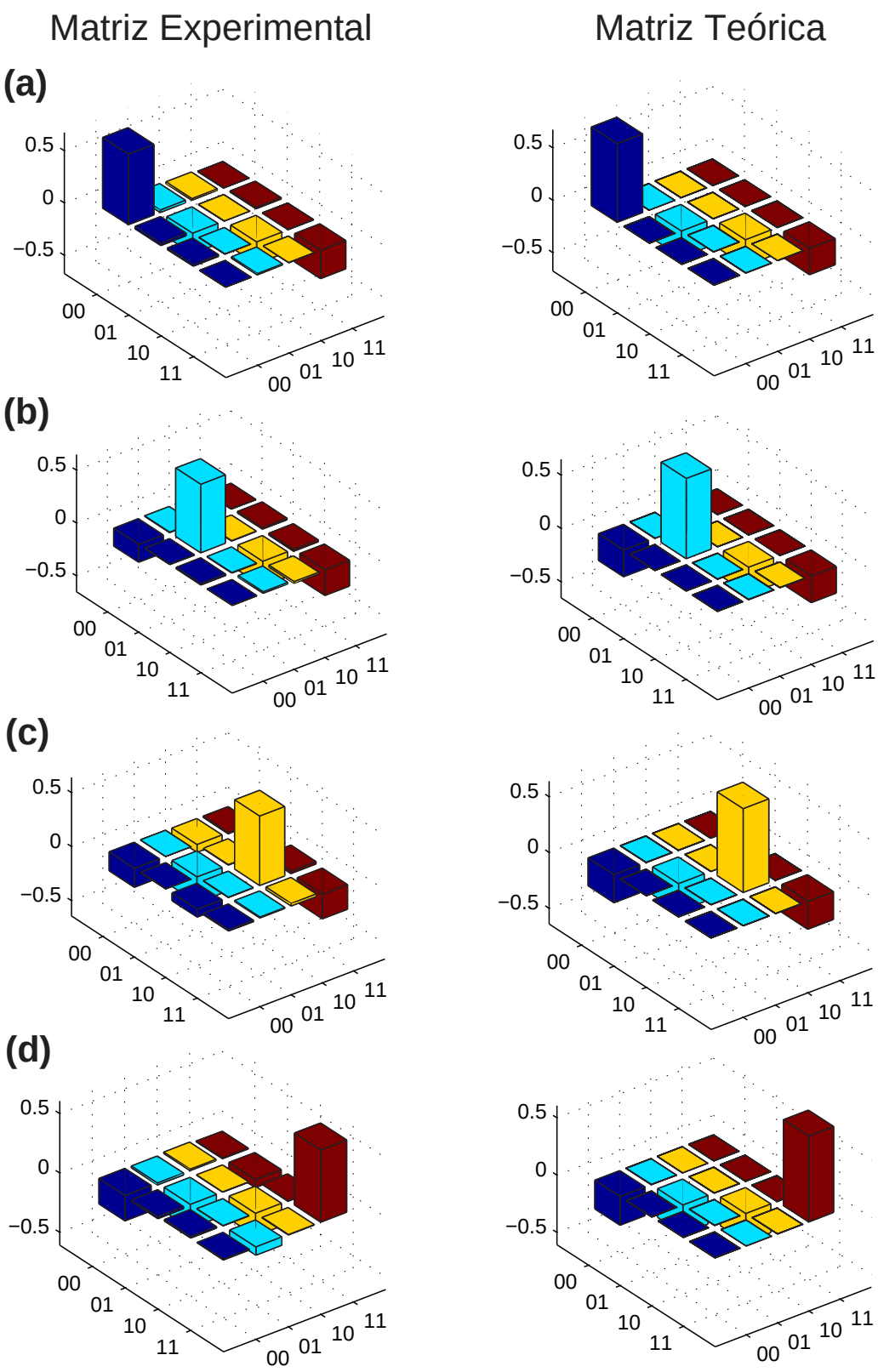


Figura 4.5: Comparação entre a parte real do desvio das matrizes densidades experimentais e teóricas para os estados pseudo puros: (a) $|00\rangle$, (b) $|01\rangle$, (c) $|10\rangle$ e (d) $|11\rangle$.

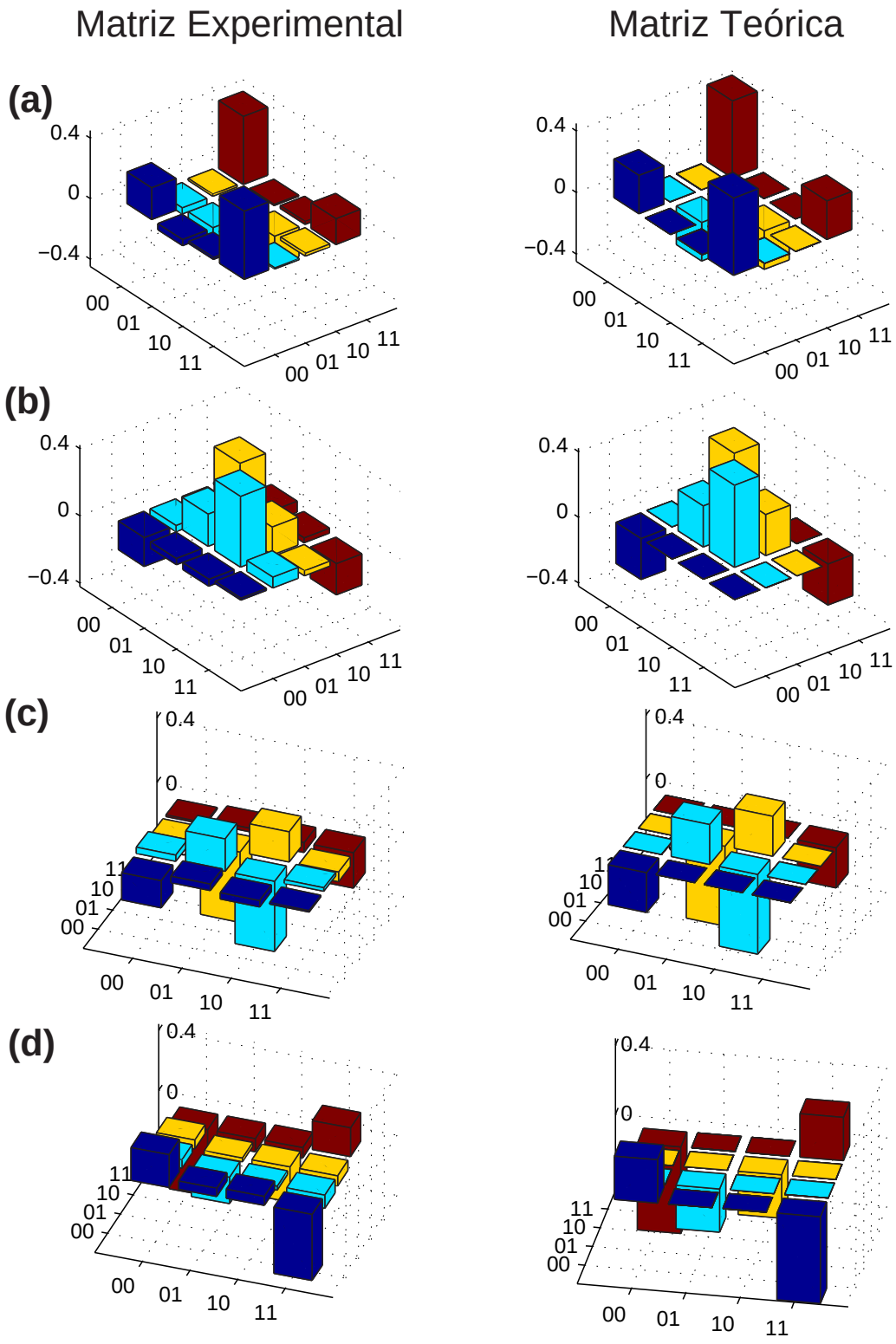


Figura 4.6: Comparação entre a parte real do desvio das matrizes densidades experimentais e teóricas para os estados pseudo emaranhados: (a) $|\phi^+\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$, (b) $|\psi^+\rangle = (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$, (c) $|\psi^-\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$ e (d) $|\phi^-\rangle = (|00\rangle - |11\rangle)/\sqrt{2}$.

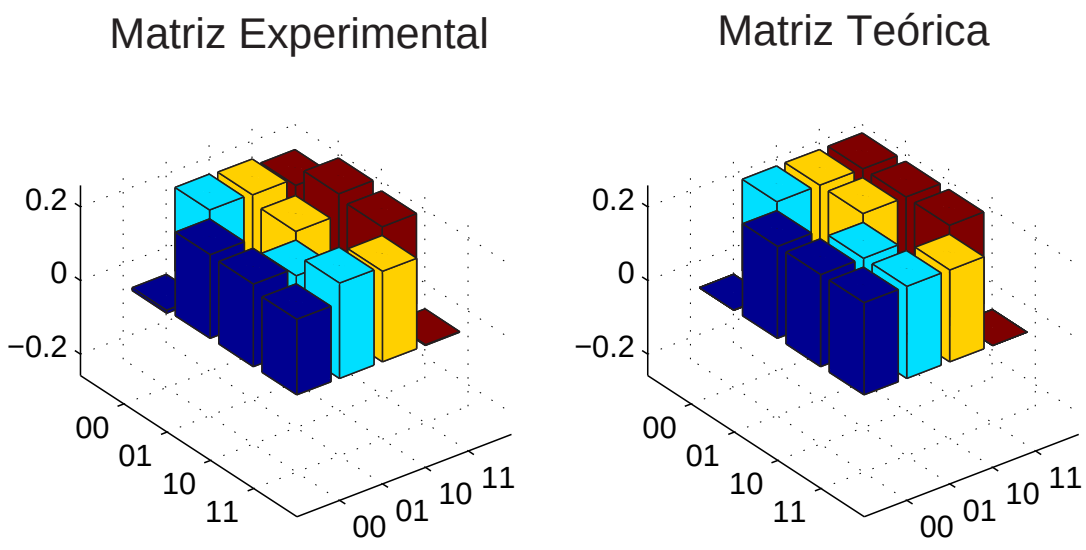


Figura 4.7: Comparação entre a parte real do desvio da matriz densidade experimental e teórica para o estado pseudo puro $(|00\rangle + |11\rangle + |01\rangle + |10\rangle)/2$.

os dados obtidos, com o experimento de RMN, com as previsões da mecânica quântica e com um experimento realizado com fótons. O experimento mais conhecido de violação das desigualdades de Bell é o experimento relizado por Aspect, Dalibard e Roger em 1982 [61]. Este experimento foi o primeiro a vencer a fuga do cone de luz e foi somente reproduzido uma vez por Wheis *et al.* [62]. O experimento de Aspect *et al.* em 1982 apenas testou a configuração onde $\theta = 22.5^0$, que corresponde a situação onde a violação é máxima. Os resultados comparados são referentes a um experimento similar que pode ser encontrado em [9].

A figura (4.8) mostra que os resultados obtidos com o método desenvolvido neste trabalho seguem as previsões da mecânica quântica e também têm o mesmo comportamento do experimento realizado com fótons. Os erros são devidos, principalmente, a inomogeneidade do campo de RF e a pequenas imperfeições nos pulsos. A descoerência não é uma fonte importante de erro pois o tempo requerido para todo o experimento ($\sim$ 15 ms) é muito menor que os tempos característicos de descoerência, $T_1 \sim 5$ s ($T_1 \sim 15$ s) e $T_2 \sim 200$ ms ($T_2 \sim 300$ ms) para o hidrogênio (carbono). Fica claro na figura (4.8) que as fontes de erro presentes não desviam significativamente os resultados experimentais da teoria.

Nas figuras (4.9), (4.10) e (4.11), mostramos os resultados para todos os estados

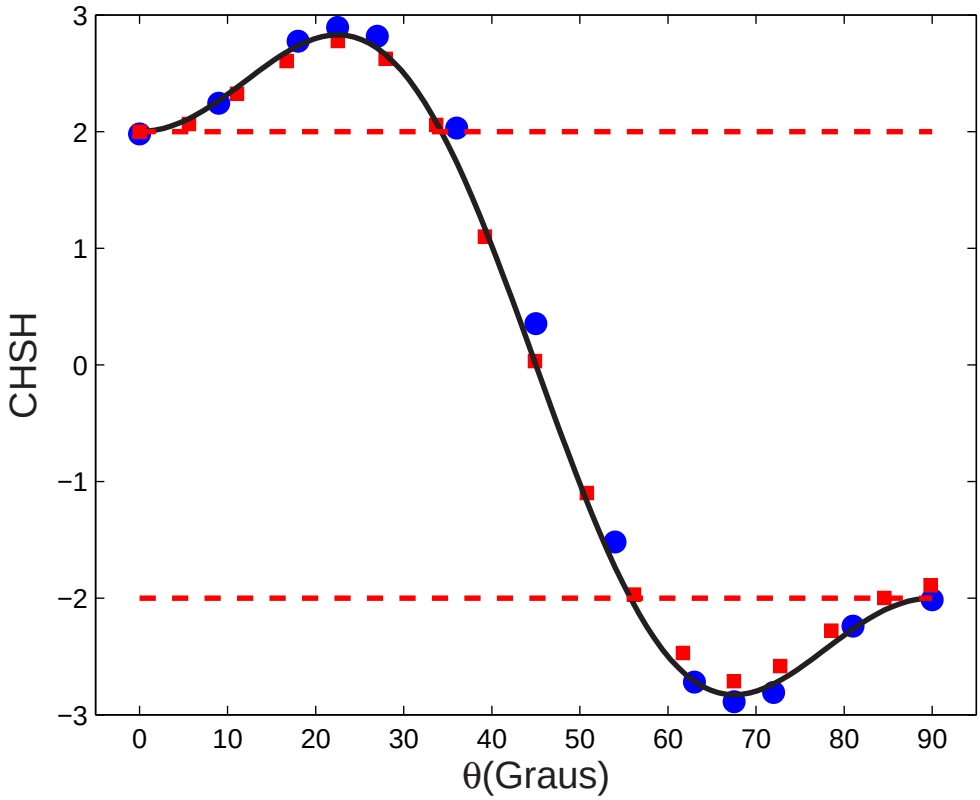


Figura 4.8: Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para o estado $|\phi^+\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. (●) são pontos experimentais de RMN, (■) são pontos extraídos de um experimento realizado com fótons e a linha sólida é a previsão da mecânica quântica.

pseudo puros testados, comparados com o modelo de variáveis ocultas descrito na seção (4.2.2). A figura (4.9) mostra os resultados para os estados separáveis $|00\rangle$ e $(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$. Como pode ser visto, não há violação da desigualdade de CHSH, como é de se esperar para estados separáveis. Na figura (4.10) mostramos os resultados para os estados pseudo emaranhados $(|00\rangle - |11\rangle)/\sqrt{2}$ e $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$. Novamente nenhuma violação ocorre, este fato é devido à escolha das direções de medida n_1, n_2, n_3 e n_4. Segundo a nossa escolha, as situações mais interessantes ocorrem para os estados $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ e $(|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$, cujos resultados são mostrados na figura (4.11). Aqui encontramos a violação da desigualdade de CHSH.

Em todos os casos, como era de se esperar, os resultados estão de acordo com a mecânica quântica. Porém, nossos resultados também estão de acordo com o modelo realístico-local. O fato de que os dados experimentais são compatíveis com ambas as

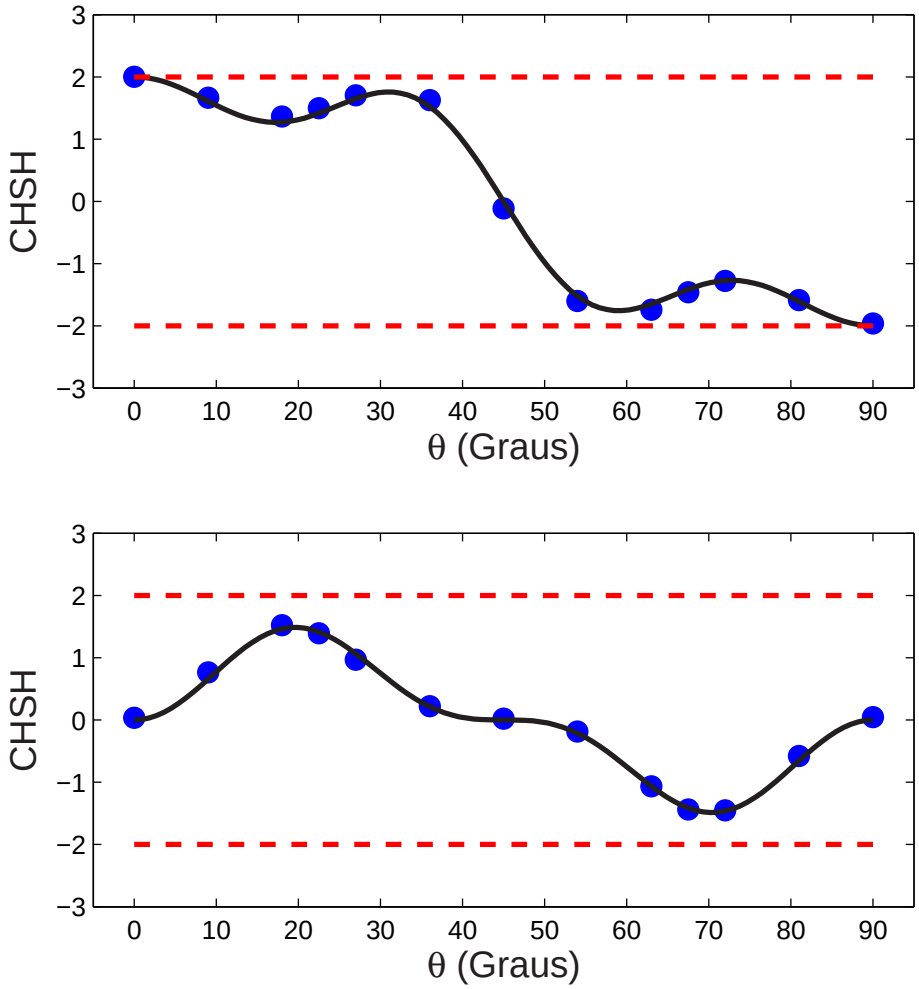


Figura 4.9: Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para os estados (a) $|00\rangle$ e (b)$(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$. (•) são pontos experimentais e a linha sólida é a previsão do modelo realístico-local.

teorias parece ser intrigante a primeira vista. Entretanto, este resultado pode ser entendido notando que um experimento de RMN é sensível apenas ao desvio da matriz densidade (4.11), que se comporta como um "estado puro emaranhado"mesmo quando todo o *ensemble* é classicamente correlacionado, como demonstrado em [10, 163].

Esta situação se assemelha ao que se chama fuga de detecção, discutida na seção 2.6.2. Geralmente em experimentos que testam as desigualdade de Bell, imperfeições no aparato experimental implicam que apenas um pequeno subconjunto do total de partículas emaranhadas é efetivamente detectado. Em princípio, o subconjunto detectado poderia conter uma distribuição de variáveis ocultas diferentes do conjunto total. Assim é possível que o subconjunto de eventos detectados viole alguma desigualdade de Bell mesmo que

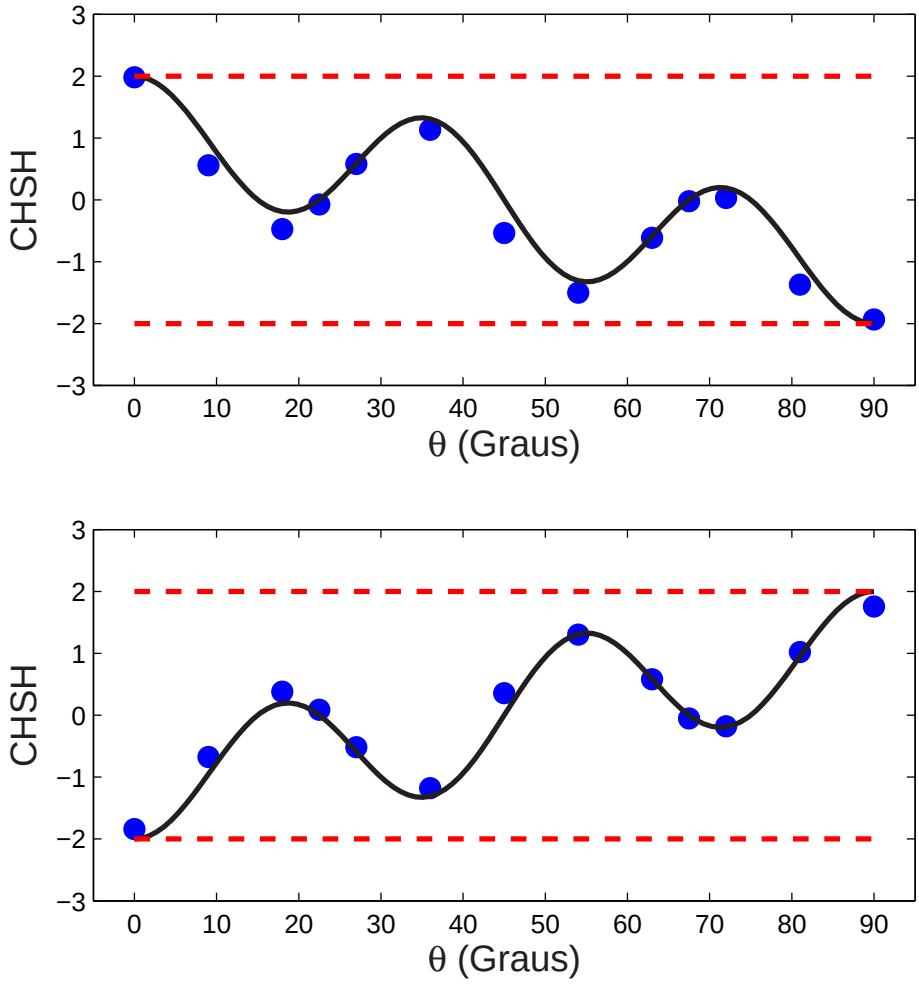


Figura 4.10: Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para os estados (a) $(|00\rangle - |11\rangle)/\sqrt{2}$ e (b) $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$. (•) são pontos experimentais e a linha sólida é a previsão do modelo realístico-local.

o conjunto total de eventos não viole. Neste caso, poderia se dizer que o subconjunto simularia a violação da desigualdade de Bell.

Para entender melhor a fuga de detecção, vamos considerar um teste da desigualdade de Bell com moedas. Neste teste Alice (Bob) possui duas moedas: MA_1 e MA_2 (MB_1 e MB_2). Tais moedas fazem analogia aos observáveis A_1, A_2, B_1 e B_2 da seção (2.6). Alice (Bob) pode escolher jogar a moeda MA_1 (MB_1) ou a moeda MA_2 (MB_2). Se der cara, o valor $+1$ é atribuído como sendo o resultado da jogada e, se der coroa, o resultado da jogada é atribuído como sendo -1. Após muitas jogadas, pode-se calcular a quantidade $CHSH$ e verificar se a desigualdade de Bell foi violada. Como as moedas são objetos "clássicos", Alice e Bob não devem encontrar nenhuma violação, no entanto,

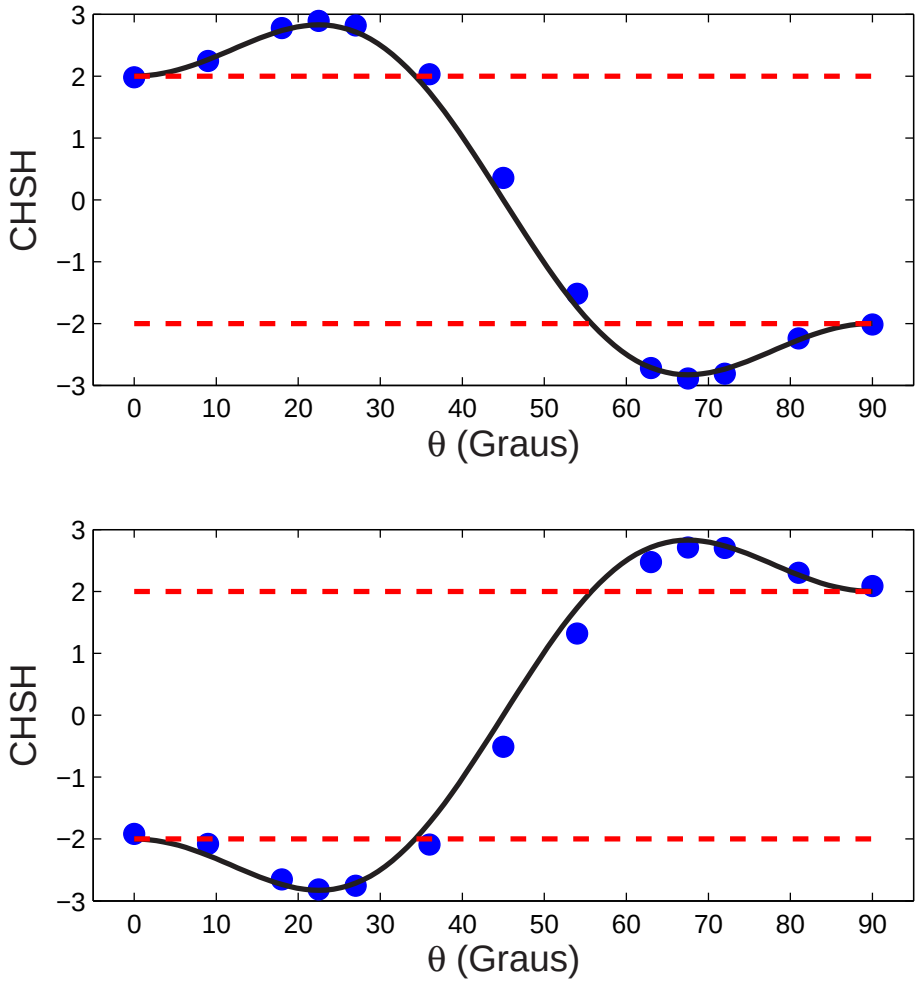


Figura 4.11: Resultados da simulação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt para os estados (a) $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ e (b)$(|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$. (•) são pontos experimentais e a linha sólida é a previsão do modelo realístico-local.

pode existir um subconjunto de jogadas "aparentemente correlacionadas"que viole a desigualdade de Bell. Se Alice e Bob escolherem o subconjunto adequado para calcular $CHSH$, desprezando as demais jogadas, é possível que eles encontrem uma violação da desigualdade de Bell mesmo que o conjunto total de jogadas não viole. Esta aparente violação não seria uma violação real, pois Alice e Bob estariam desprezando diversas jogadas e selecionando apenas aquelas que levam a violação. Assim, se de alguma maneira, a natureza for local-realística porém, os experimentos atuais imperfeitos realizados com fótons ou outros sistemas físicos quânticos detectam mais eficientemente o subconjunto de eventos que estariam aparentemente correlacionados, então seria possível encontrar uma "aparente violação"sem que de fato a violação ocorra.

Para contornar o problema da fuga de detecção, utiliza-se a hipótese de amostragem justa (do inglês *fair sampling hypothesis*), ou seja, a hipótese de que o *subensemble* detectado representa fielmente todo o sistema. No caso da RMN, não podemos evocar esta hipótese, uma vez que os spins não detectados estão no estado completamente misturado e não no estado emaranhado desejado. Além disto, os experimentos de RMN possuem uma descrição realística-local que está de acordo com as observações experimentais, como mostram as figuras (4.9), (4.10) e (4.11). Portanto estes experimentos são apenas uma simulação, mas que podem ser úteis em vários outros casos, por exemplo, onde o aparato experimental − dos experimentos de ótica ou de outras técnicas − se tornam muito complicados.

4.3 Conclusões

Resumindo, a simulação da violação de uma desigualdade de Bell foi feita com sucesso através da RMN. A fidelidade da simulação foi testada através da comparação entre nossos resultados e as previsões da mecânica quântica e um experimento realizado com fótons. Também mostramos que o mesmo conjunto de dados experimentais pode ser explicado tanto pela mecânica quântica quanto pelo modelo de variáveis ocultas proposto para RMN por Menicucci e Caves [10]. Este resultado pode ser visto como uma demonstração experimental de como ambas as teorias podem ser compatíveis devido a fuga de detecção. Devemos enfatizar que o modelo de Menicucci e Caves é válido apenas para experimentos de RMN que acessam estado separáveis, e não para os experimentos com fótons. Assim, apesar dos resultados experimentais obtidos com fótons e spins nucleares praticamente coincidirem, apenas os dados de RMN podem ser explicados com o modelo realístico-local.

O método desenvolvido aqui pode ser aplicado para simular resultados de diferentes desigualdades de Bell, com configurações distintas e com vários q-bits. Tais desigualdades de Bell não são apenas importantes no contexto do problema das variáveis ocultas. Um exemplo de aplicação interessante das desigualdades de Bell, que não tem relação direta com os fundamentos da mecânica quântica, é apresentado por Pál e Vértesi [175]. Neste trabalho, foi demonstrado que algumas desigualdades de Bell podem ser usadas como "testemunhas de dimensão", quantidades que podem ser utilizadas para inferir a dimensionalidade do sistema. A idéia central é determinar, a partir de uma dada distribuição de probabilidades, a dimensão do sistema que gerou tal distribuição.

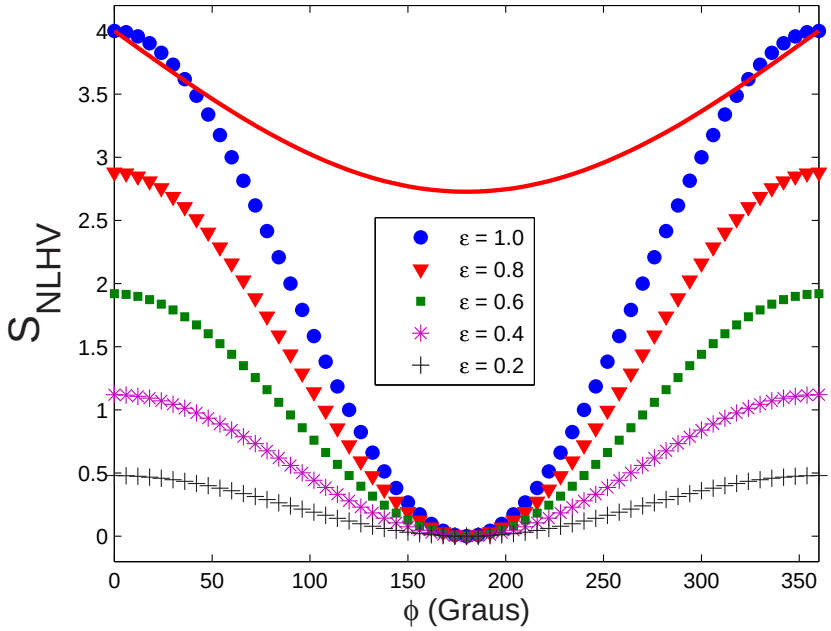


Figura 4.12: Simulação computacional da violação da desigualdade (2.3) para vários valores de polarização ϵ. A linha sólida representa o limite imposto por modelos realísticos. Os pontos acima da linha sólida não possuem uma descrição realística.

É importante mencionar que o mesmo experimento realizado com um *ensemble* de spins altamente polarizados não seria compatível com o modelo clássico. Recentemente, um estado emaranhado praticamente puro foi produzido com polarização $\epsilon = 0.916 \pm 0.019$ [172]. O emaranhamento da formação relatado para tal estado foi de aproximadamente $\sim 0.822 \pm 0.039$.

Do ponto de vista experimental, a diferença entre o mesmo estado pseudo puro com baixa polarização e alta polarização é apenas a intensidade do sinal de RMN. O fato marcante, é que o primeiro possui uma descrição clássica de variáveis ocultas e o segundo não. Portanto, em um *ensemble* de spins altamente polarizados, o modelo de Menicucci e Caves [10] não reproduz os valores esperados da mecânica quântica e uma verdadeira violação das desigualdades de Bell é esperada. Devemos enfatizar que mesmo quando um estado de RMN é verdadeiramente emaranhado, ele não pode ser utilizado para provar efeitos não-locais, uma vez que a RMN é intrinsecamente local. Porém, a hipótese do realismo pode ser testada.

Particularmente interessante para a RMN são aquelas desigualdades construídas para testar o realismo, e não fazem uso da hipótese da localidade, como a recentemente testada

em [63] (ver seção 2.6.2). Na figura (4.12), mostramos uma simulação computacional, utilizando o mesmo modelo de RMN para simular os resultados experimentais, da violação das desigualdades propostas em [63]. Nós simulamos o esquema descrito neste capítulo usando a matriz densidade de RMN (4.11) para vários valores de ϵ. A linha sólida representa o limite imposto pelo realismo e a região acima do limite não possui uma descrição realística.

Há também aquelas desigualdades que não precisam de emaranhamento [2] para serem violadas [176], tal como a desigualdade temporal de Bell [70], cujas propostas recentes baseadas em medidas fracas [72, 73] poderiam ser adaptadas para RMN.

Além da habilidade de simular sistemas quânticos, acreditamos que a computação quântica por RMN possa também ser usada para testar fundamentos de mecânica quântica. Este tema tem sido pouco explorado fora do contexto da ótica. Entretanto, acreditamos que a habilidade de criar estados verdadeiramente emaranhados em *ensembles* de spins polarizados, aliada ao alto grau de controle da RMN, podem ser de grande utilidade, tanto para demonstrações de computação quântica quanto para o estudo de fundamentos da mecânica quântica.

[2] Note que mesmo neste caso, a polarização deve ser aumentada pois o modelo [10] elimina a possibilidade da violação de qualquer tipo de desigualdade de Bell para $\epsilon \leq 1/(1 + 2^{2N-1})$.

5

Emaranhamento em uma cadeia de spins

Neste capítulo apresentaremos um estudo sobre emaranhamento térmico em uma cadeia de spins formada no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. A presença do emaranhamento foi investigada através de duas quantidades, uma testemunha de emaranhamento e o emaranhamento da formação, ambas derivadas da susceptibilidade magnética. Além da observação experimental do emaranhamento pela susceptibilidade magnética, também realizamos um estudo teórico sobre o comportamento do emaranhamento em função do campo aplicado e da temperatura.

Nas duas primeiras seções deste capítulo, desenvolvemos o conceito de emaranhamento térmico e de testemunhas de emaranhamento termodinâmicas. Na seção 5.3, uma breve descrição do sistema estudado é apresentada. A seção seguinte, 5.4, contém os resultados experimentais da susceptibilidade magnética a campo zero e um estudo teórico da evolução do emaranhamento em função do campo aplicado e da temperatura. Na última seção, alguns comentários são feitos e as conclusões são apresentadas. Este trabalho foi publicado no periódico *Physical Review B* [177].

5.1 Emaranhamento térmico

Características genuinamente quânticas, tal como o emaranhamento, geralmente não são vistas além da escala atômica e a altas temperaturas. O argumento mais comum contra o emaranhamento em sistemas macroscópicos a temperaturas finitas é de que objetos macroscópicos possuem um grande número de constituintes que interagem com o ambiente, induzindo o fenômeno conhecido como descoerência, que leva à perda do emaranhamento à medida que a massa, complexidade e temperatura do sistema aumentam.

No entanto, foi demonstrado teoricamente [5, 6] que estados emaranhados podem existir em sólidos a temperaturas finitas. Este tipo de emaranhamento é chamado na literatura de "Emaranhamento Térmico ".

O conceito de emaranhamento térmico pode algumas vezes ser confundido com o conceito de emaranhamento macroscópico. Portanto é importante estabelecer a diferença entre ambos. Emaranhamento térmico se refere ao emaranhamento que ocorre em um sistema a temperatura finita. O emaranhamento macroscópico, se refere ao emaranhamento entre objetos macroscópicos, tal como o emaranhamento entre dois q-bits supercondutores [178, 179]. Assim, é possível existir emaranhamento térmico em um sólido macroscópico, porém se este emaranhamento estiver restrito apenas a poucos átomos do sólido, o emaranhamento não será macroscópico.

Desde os primeiros trabalhos de Nielsen [5] e Arnesen *et al.* [6] propondo a existência de emaranhamento térmico, diversos trabalhos teórico foram publicados [180–194]. Porém, poucas evidências experimentais confirmando a presença deste tipo de emaranhamento em sistemas de estado sólido têm sido relatadas [7, 195–197].

A primeira evidência experimental de emaranhamento em sólidos foi reportada em [7]. Neste artigo, Ghosh e colaboradores fizeram medidas da susceptibilidade magnética a baixas temperaturas ($T < 1$ K) no composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$ e encontraram que a dependência da susceptibilidade com a temperatura era bem ajustada pela lei de potência $\chi \sim T^{\alpha}$ com $\alpha \sim 0.75$. O ponto chave observado por Ghosh *et al.* foi o fato de que os dados experimentais não podiam ser explicados apenas com aproximações clássicas ou semi-clássicas (ver figura (5.1)). A conclusão principal do trabalho de Ghosh *et al.* é que o emaranhamento é o ingrediente fundamental para a explicação da lei de potência observada. Posteriormente Brukner *et al.* [195] analisaram dados publicados anteriormente e encontraram emaranhamento entre os spins dos átomos de cobre no composto $CN[Cu(NO_3)_2 2.5D_2O]$ abaixo de $T \sim 5.6$ K.

Outro importante resultado experimental foi reportado por Vértesi e Bene [196]. Eles estudaram a susceptibilidade magnética do composto $Na_2V_3O_7$ e estimaram a temperatura crítica abaixo da qual existe emaranhamento. O valor experimental encontrado para esta temperatura foi de aproximadamente ~ 365 K. Assim eles demonstraram pela primeira vez que o emaranhamento pode existir a temperatura ambiente. Recentemente, Rappoport *et al.* [197] encontram emaranhamento entre átomos de Mn^{+2} (spin 5/2) no composto $MgMnB_2O_5$ abaixo de $T \sim 20$K e entre átomos de Ti^{+3} (spin 1/2) no composto

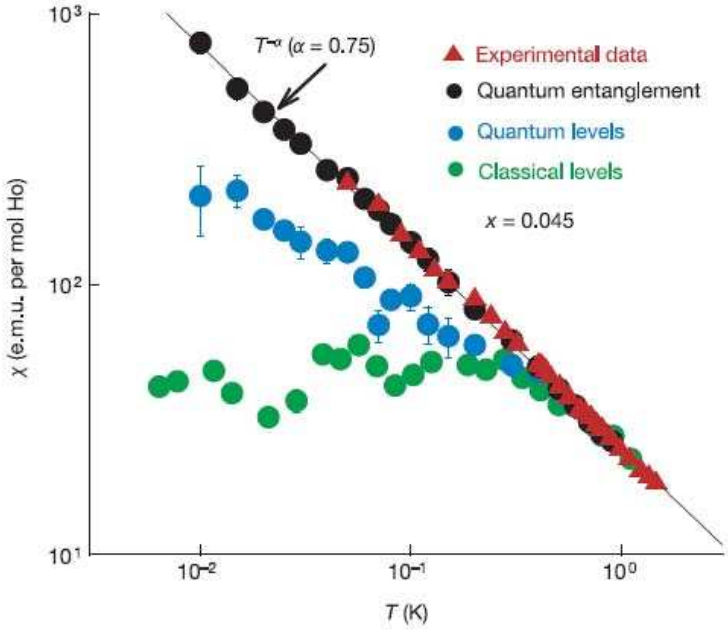


Figura 5.1: Susceptibilidade magnética do composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$. (▲) Dados Experimentais. • Cálculo teórico utilizando o emaranhamento quântico. (●) Calculo teórico utilizando aproximações semi-clássicas. (●) Cálculo teórico utilizando física clássica

$MgTiOBO_3$ abaixo de $T \sim 100$K.

O estudo do emaranhamento que ocorre naturalmente em sólidos (para uma revisão detalhada ver [198]) é de grande relevância para a computação quântica pois muitas propostas de chips quânticos são baseadas em sistemas de estado sólido. Também há propostas de utilização de materiais que possuem emaranhamento como fontes de emaranhamento. Uma proposta teórica recente de extração de emaranhamento pode ser encontrada em [199]. Além disso, resultados recentes têm demonstrado que o emaranhamento pode ser uma peça importante para o entendimento dos fenômenos observados em sistemas de estado sólido. Um exemplo é o resultado experimental encontrado por Ghosh *et al.* [7] e a recente conexão teórica estabelecida entre o emaranhamento e transições de fase quântica [200–204]. Todos estes resultados sugerem que o estudo do emaranhamento em sólidos pode resultar em uma interessante conexão entre a física do estado sólido e a teoria da informação e computação quântica.

5.2 Testemunhas de emaranhamento termodinâmicas

O conceito de testemunha de emaranhamento foi introduzido no capítulo 2. Por definição, uma testemunha de emaranhamento EW é um operador Hermitiano que possui valor esperado positivo ($Tr(EW\rho) \geq 0$), para todos os estados separáveis e negativo para alguns estados emaranhados. Desta forma, uma testemunha de emaranhamento é capaz de identificar a presença de alguns estados emaranhados. É importante enfatizar que em geral uma testemunha de emaranhamento não é capaz de identificar todos os estados emaranhados. Em outras palavras, se $Tr(EW\rho) < 0$ podemos inferir sem dúvidas que há emaranhamento no sistema, porém a condição $Tr(EW\rho) \geq 0$ não necessariamente implica em separabilidade.

Para o estudo experimental do emaranhamento é interessante encontrar testemunhas de emaranhamento mensuráveis. Nos sistemas macroscópicos a temperatura finita, como os sólidos, estas quantidades devem ser funções termodinâmicas. Assim, uma testemunha de emaranhamento derivada de uma função termodinâmica é chamada de testemunha de emaranhamento termodinâmica. Até o momento diversas quantidades termodinâmicas, tais como a magnetização [186], energia interna [180–187] e a capacidade térmica [187] têm sido propostas como testemunhas de emaranhamento. No entanto, todas elas dependem do conhecimento da Hamiltoniana do sistema. Assim, estas quantidades só funcionam para modelos específicos. Por exemplo: a testemunha de emaranhamento baseada na energia interna dada em [184] só é válida para cadeias de spin descritas pelo modelo de Heisenberg.

Recentemente, foi demonstrado por Wieśniak *et al.* [205] que a susceptibilidade magnética pode ser usada como uma testemunha de emaranhamento. Esta testemunha possui a vantagem de não depender da Hamiltoniana do sistema e pode ser aplicada a um sistema genérico compreendido por N spins de módulo s. O único vínculo imposto é que a Hamiltoniana interna da cadeia de spins, denotada por $\mathcal{H}_0$, deve comutar com a Hamiltoniana externa $\mathcal{H}_1 = H\sum_k S_k^z$, que descreve a interação do sistema com um campo magnético externo H aplicado na direção z. Se tal vínculo for satisfeito, é possível mostrar que a susceptibilidade magnética para o sistema de N spins na direção α é dada

por [205]:

$$\chi^{\alpha}(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T}\Delta^2 S^{\alpha} = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T}\left(\sum_{j,k=1}^{N}\langle S_j^{\alpha} S_k^{\alpha}\rangle - \left\langle\sum_{k=1}^{N} S_k^{\alpha}\right\rangle^2\right), \tag{5.1}$$

onde g é o fator de Landé, μ_B é o magneton de Bohr e $\Delta^2 M^{\alpha} = (g\mu_B)^2\Delta^2 S^{\alpha}$ é a dispersão da magnetização na direção α. A partir de (5.1) podemos derivar uma testemunha de emaranhamento. O primeiro passo para encontrar a testemunha é notar que as relações

$$\langle (S^x)^2\rangle + \langle (S^y)^2\rangle + \langle (S^z)^2\rangle = \langle S^2\rangle = \quad s(s+1) \text{ e} \tag{5.2}$$

$$\langle S^x\rangle^2 + \langle S^y\rangle^2 + \langle S^z\rangle^2 \leq s^2 \tag{5.3}$$

são sempre válidas para um único spin s. A primeira relação pode ser demonstrada usando os autovalores do operador S^2 , onde $S^2|s,m\rangle = s(s+1)|s,m\rangle$ [158], como base e calculando explicitamente o valor médio $\langle S^2\rangle$.

$$\begin{aligned}
\langle S^2\rangle &= Tr(\rho S^2) \\
\langle S^2\rangle &= \sum_k p_k Tr(S^2|s,m\rangle_k\langle s,m|_k) \\
\langle S^2\rangle &= s(s+1)\sum_k p_k \\
\langle S^2\rangle &= s(s+1).
\end{aligned} \tag{5.4}$$

A segunda relação pode ser verificada notando que a projeção do spin em qualquer direção não pode ser maior que s. Subtraindo (5.2) e (5.3), chegamos a seguinte relação:

$$\Delta^2 S = \Delta^2 S^x + \Delta^2 S^y + \Delta^2 S^z \geq s. \tag{5.5}$$

Quando o estado térmico $\rho(T)$ de N spins é um estado completamente separável, ou seja, pode ser descrito por:

$$\rho = \sum_k p_k \rho_{1,k}\otimes\rho_{2,k}\otimes\cdots\otimes\rho_{N,k}, \tag{5.6}$$

é fácil mostrar, substituindo (5.6) em (5.1), que a dispersão da magnetização é dada por:

$$\Delta^2 M = \Delta^2 M^x + \Delta^2 M^y + \Delta^2 M^z = \sum_n\sum_k p_k (g\mu_B)^2\Delta^2 S_{n,k}, \tag{5.7}$$

onde $\Delta^2 S_{n,k}$ é a dispersão de S^2 referente à componente $\rho_{n,k}$. Relacionando (5.5) com

(5.7), temos que a média da susceptibilidade ao longo de três eixos ortogonais satisfaz à condição:

$$\bar{\chi} = \frac{\chi^x + \chi^y + \chi^z}{3} = \frac{(g\mu_B)^2}{3k_BT}\Delta^2 S \geq \frac{(g\mu_B)^2 s}{3k_BT}\sum_n \sum_k p_k \geq \frac{(g\mu_B)^2 Ns}{3k_BT}. \tag{5.8}$$

Note que (5.8) é saturada se o estado do sistema for um estado puro no qual o número quântico magnético m com respeito a qualquer direção é máximo, isto é $|s, m = s\rangle$, situação que corresponde a todos os spins alinhados em uma mesma direção. A desigualdade (5.8) pode ser interpretada como uma testemunha de emaranhamento, uma vez que estados separáveis não podem violar tal desigualdade. Assim sendo, a condição $\bar{\chi} < (g\mu_B)^2 Ns/3k_BT$ implica necessariamente em emaranhamento. De acordo com a definição de testemunha de emaranhamento dada no capítulo 2, podemos redefinir a testemunha de emaranhamento para N spins como sendo:

$$EW(N) = \frac{3k_BT\bar{\chi}^{exp}(T)}{(g\mu_B)^2 Ns} - 1, \tag{5.9}$$

onde $EW(N) < 0$ implica em emaranhamento.

5.3 O composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$

Nesta seção são discutidos brevemente os aspectos do composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$ mais relevantes relacionados a este trabalho. Descrições mais detalhadas sobre as propriedades magnéticas, estruturais e térmicas, incluindo detalhes de como o composto foi preparado, podem ser encontradas em [206–208].

A estrutura do $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$ está ilustrada na figura (5.2). Os átomos de cobre possuem $s = 1/2$ e estão separados em dois grupos, cada um contendo dois e três átomos, chamados de dímero e trímero, respectivamente. Existe uma interação indireta, de troca, entre os átomos de cobre mediada pela nuvem eletrônica do oxigênio. Os três spins dos átomos que formam o trímero são acoplados antiferromagneticamente, enquanto que os dois spins dos átomos do dímero são acoplados ferromagneticamente. Além disso, os dois grupos de spins, dímero e trímero, interagem antiferromagneticamente. Rotulando os spins de acordo com a figura (5.3), o magnetismo do sistema pode ser descrito pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J_1(\vec{S_1}\cdot\vec{S_2} + \vec{S_2}\cdot\vec{S_3}) - J_2(\vec{S_A}\cdot\vec{S_B}) - J_3(\vec{S_4}\cdot\vec{S_5}) - g\mu_B\vec{H}\cdot\vec{S}, \tag{5.10}$$

onde $\vec{H}$ é um campo magnético externo, $\vec{S_A} = \vec{S_4} + \vec{S_5}$ é o spin total do dímero, $\vec{S_B} = \vec{S_1} + \vec{S_2} + \vec{S_3}$ é o spin total do trímero e $\vec{S} = \vec{S_A} + \vec{S_B}$ é o spin total do sistema dímero-trímero. Os valores das integrais de troca foram determinadas experimentalmente [206] como sendo $J_1 = -224.9$ K, $J_3 = 40.22$ K e $J_2 = -8.01$ K, onde o sinal positivo significa acoplamento ferromagnético e o sinal negativo significa acoplamento antiferromagnético. Na tabela (5.1) são mostrados todos os autovalores que foram calculados diagonalizando a Hamiltoniana (5.10) sem campo aplicado.

Autovalor	s	s_A	s_B	s_z
$J_1 + J_2 - \frac{1}{4}J_3$	1/2	1	1/2	$\pm 1/2$
$J_1 - \frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{4}J_3$	3/2	1	1/2	$\pm 3/2$ e $\pm 1/2$
$J_1 + \frac{3}{4}J_3$	1/2	0	1/2	$\pm 1/2$
$J_2 - \frac{1}{4}J_3$	1/2	1	1/2	$\pm 1/2$
$-\frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{4}J_3$	3/2	1	1/2	$\pm 3/2$ e $\pm 1/2$
$\frac{3}{4}J_3$	1/2	0	1/2	$\pm 1/2$
$-\frac{1}{2}J_1 + \frac{5}{2}J_2 - \frac{1}{4}J_3$	1/2	1	3/2	$\pm 1/2$
$-\frac{1}{2}J_1 + J_2 - \frac{1}{4}J_3$	3/2	1	3/2	$\pm 3/2$ e $\pm 1/2$
$-\frac{1}{2}J_1 - \frac{3}{2}J_2 - \frac{1}{4}J_3$	5/2	1	3/2	$\pm 5/2$, $\pm 3/2$ e $\pm 1/2$
$-\frac{1}{2}J_1 + \frac{3}{4}J_3$	3/2	0	3/2	$\pm 3/2$ e $\pm 1/2$

Tabela 5.1: Autovalores da Hamiltoniana (5.1), sem campo aplicado. Os autovalores são mostrados em ordem crescente, ou seja, o primeiro autovalor é o de menor energia.

A temperatura finita T, o estado de equilíbrio térmico do sistema é descrito pela matriz densidade $\rho(T) = \exp(-\mathcal{H}/k_BT)/Z$ onde $Z = Tr[\exp(-\mathcal{H}/k_BT)]$ é a função de partição. A partir de $\rho(T)$ é possível calcular quantidades termodinâmicas, tal como a susceptibilidade magnética. Como a Hamiltoniana $\mathcal{H}$ comuta com a componente de spin S^z, a susceptibilidade pode ser calculada a partir da expressão (5.1) apenas substituindo $\langle S_j^\alpha S_i^\alpha \rangle = Tr(S_j^\alpha S_i^\alpha \rho(T))$ e $\langle \sum_i S_i^\alpha \rangle = Tr(\sum_i S_i^\alpha \rho(T))$ na equação (5.1). Na figura (5.4), a susceptibilidade magnética teórica ($\bar{\chi}^{teo}$), calculada numericamente, é comparada em função da temperatura com a susceptibilidade magnética experimental ($\bar{\chi}^{exp}$), obtida através de medidas, utilizando um magnetrômetro SQUID (do inglês *superconducting*

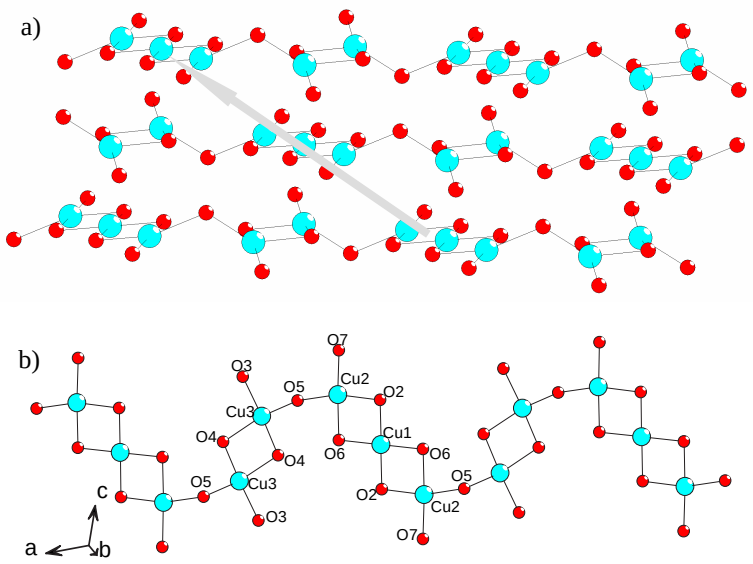


Figura 5.2: Estrutura do composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$ ilustrada de dois pontos de vista. Os círculos menores (vermelhos) representam os átomos de oxigênio e os círculos maiores (azuis) representam os átomos de cobre. Em (a) ilustramos a vista lateral e em (b) mostramos a visão superior da cadeia.

quantum interference device) da Universidade de Aveiro em Portugal, com um campo aplicado de 100 Oe. Como podemos ver na figura, a susceptibilidade aumenta à medida em que a temperatura diminui até aproximadamente 8 K, neste ponto existe uma queda abrupta associada a uma transição para a fase 3D [206]. É importante ressaltar que o modelo dímero-trímero não funciona abaixo deste ponto. A boa concordância entre os dados experimentais e o cálculo teórico acima de 8 K mostram a fidelidade do modelo dímero-trímero descrito pela Hamiltoniana (5.10) nesta faixa de temperatura.

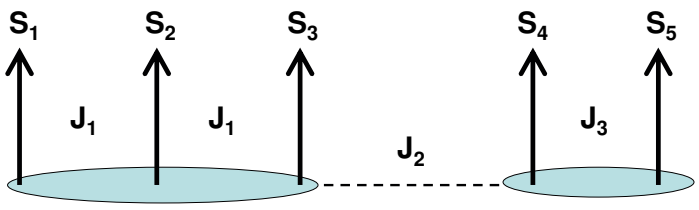


Figura 5.3: Representação esquemática do sistema dímero-trímero.

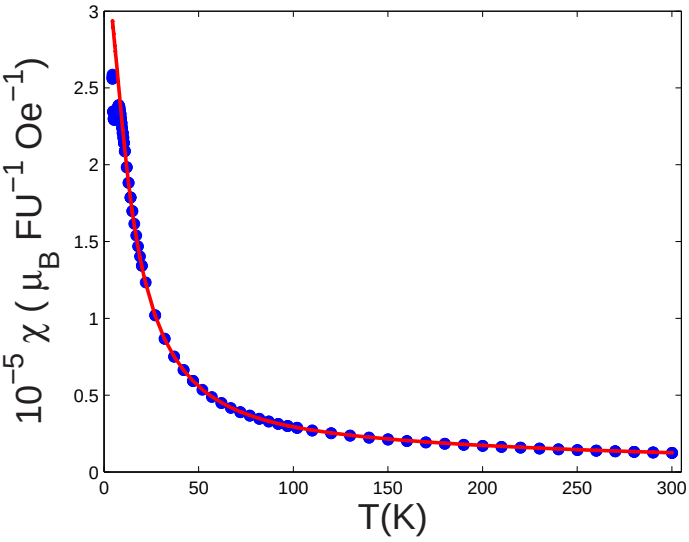


Figura 5.4: Susceptibilidade magnética em função da temperatura com campo aplicado de 100 Oe. Os pontos (•) são os resultados experimentais e a linha sólida é a previsão teórica, baseada na equação (5.1).

5.4 Resultados

Nesta seção apresentaremos os resultados obtidos. Primeiramente apresentaremos os resultados experimentais obtidos sem a aplicação do campo magnético externo e posteriormente passaremos para os resultados referentes ao estudo teórico da evolução do emaranhamento em função do campo aplicado e da temperatura.

5.4.1 Emaranhamento sem campo aplicado

Para determinar o emaranhamento do sistema dímero-trímero, utilizamos duas quantidades derivadas da susceptibilidade magnética. A primeira é a testemunha de emaranhamento definida na seção 5.2 e a segunda é o emaranhamento da formação, introduzido no capítulo 2. A seguir mostraremos os resultados para ambas as quantidades separadamente.

5.4.1.1 Testemunha de emaranhamento

A quantidade básica para se estudar o emaranhamento em sistemas magnéticos é a testemunha de emaranhamento $EW(N)$ definida em (5.9). Substituindo $N = 5$, que é o caso para o composto estudado, podemos aplicar a testemunha ao nosso sistema dímero-

trímero e determinar a presença de emaranhamento. Tal testemunha pode revelar a presença de emaranhamento, porém não dará nenhuma informação sobre o grau deste e tão pouco pode determinar quais spins estão emaranhados e quais não estão. Com o objetivo de analisar o emaranhamento entre spins em um dado subsistema, é necessário derivar a contribuição da susceptibilidade $\bar{\chi}_{sub}(T)$ devido apenas aos spins de interesse. Teoricamente, isto pode ser feito a partir da equação (5.1), com a matriz densidade reduzida $\rho_{sub}(T)$, do subsistema de interesse, ao invés da matriz densidade total. A matriz $\rho_{sub}(T)$ pode ser obtida usando a operação de traço parcial [35] que soma sobre todos os estados possíveis dos spins, exceto daqueles que pertencem ao subsistema de interesse.

A partir do cálculo matemático da susceptibilidade total e da susceptibilidade referente apenas a um dado grupo de spins, podemos definir a razão $R^{teo}_{sub}(T) = \bar{\chi}^{teo}_{sub}(T) / \bar{\chi}^{teo}(T)$ que representa a fração da contribuição do subsistema para susceptibilidade total. Com esta quantidade, que pode ser calculada apenas com o conhecimento da Hamiltoniana, é possível extrair separadamente, a partir dos dados experimentais que contém a contribuição de todos os spins, a susceptibilidade magnética do trímero $\bar{\chi}^{exp}_{Tri}(T) = R^{teo}_{Tri}(T) \times \bar{\chi}^{exp}(T)$, do dímero $\bar{\chi}^{exp}_{Dim}(T) = R^{teo}_{Dim}(T) \times \bar{\chi}^{exp}(T)$ ou de outro subgrupo de spins.

Na figura (5.5), os dados experimentais estão ilustrados. Como podemos ver, a quantidade $EW(5)$ extraída da susceptibilidade magnética total é sempre negativa para qualquer temperatura abaixo de $\sim$ 110 K, mostrando que há emaranhamento no sistema. Além disso, a testemunha de emaranhamento $EW(3)$, referente ao trímero, é negativa abaixo de $\sim$ 240 K e a $EW(2)$, referente ao dímero, é sempre positiva. Isto sugere que o emaranhamento apenas ocorre entre os spins do trímero.

5.4.1.2 Emaranhamento da formação

Para quantificar o emaranhamento entre pares de spins, utilizamos o emaranhamento da formação, introduzido na seção (2.3.2). Geralmente esta quantidade é calculada a partir da matriz densidade, porém estabelecemos uma relação entre esta e a susceptibilidade magnética. Isto permitiu a obtenção direta da EF a partir dos dados experimentais. Esta relação pode ser obtida da seguinte maneira: como a Hamiltoniana (5.10) comuta com S^z, podemos escrever a matriz densidade reduzida dos spins localizados nos sítios i

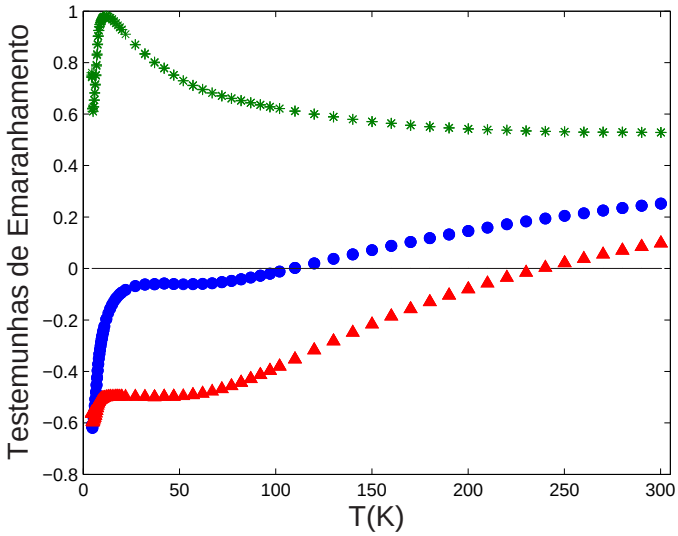


Figura 5.5: Testemunha de emaranhamento para o sistema total $EW(5)$ (•), para o trímero $EW(3)$ (▲) e para o dímero $EW(2)$ (*).

e j como $[180, 209]$:

$$\rho_{ij}(T) = \begin{pmatrix} u^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_1 & z^* & 0 \\ 0 & z & \omega_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u^- \end{pmatrix}, \tag{5.11}$$

onde

$$u^{\pm} = \frac{1 \pm 2\langle S_i^z + S_j^z \rangle + 4\langle S_i^z S_j^z \rangle}{4} \text{ e} \tag{5.12}$$

$$z = \langle S_i^x S_j^x \rangle + \langle S_i^y S_j^y \rangle + i\langle S_i^x S_j^y \rangle - i\langle S_i^y S_j^x \rangle. \tag{5.13}$$

Para demonstrar (5.11), considere uma matriz densidade genérica de dois q-bits

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{13}^* & \rho_{23}^* & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{14}^* & \rho_{24}^* & \rho_{34}^* & \rho_{44} \end{pmatrix}. \tag{5.14}$$

Calculando explicitamente o comutador $[\rho, S_1^z + S_2^z]$, temos:

$$[\rho, S_1^z + S_2^z] = \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{12} & -\rho_{13} & -2\rho_{14} \\ \rho_{12}^* & 0 & 0 & -\rho_{24} \\ \rho_{13}^* & 0 & 0 & -\rho_{34} \\ 2\rho_{14}^* & \rho_{24}^* & \rho_{34}^* & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.15}$$

Portanto se ρ comuta com $S_1^z + S_2^z$, então $\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{14} = \rho_{24} = \rho_{34} = 0$ e logo a matriz reduzida de dois spins quaisquer da rede deve assumir a forma (5.11). Para demonstrar (5.12) e (5.13), expandimos (5.11) na forma:

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{3} \sum_{\beta=0}^{3} A_{\alpha\beta} S_1^\alpha S_2^\beta, \tag{5.16}$$

onde $S_i^0 = \mathbb{1}$, $S_i^1 = S_i^x$, $S_i^2 = S_i^y$ e $S_i^3 = S_i^z$. Os coeficientes $A_{\alpha\beta}$ estão relacionados com funções de correlação através da relação $A_{\alpha\beta} = Tr(\rho S_1^\alpha S_2^\beta) = \langle S_1^\alpha S_2^\beta \rangle$. Calculando explicitamente os elementos de matriz de (5.16) e comparando com (5.11), é fácil ver que $u^\pm$ e z se relacionam com as funções de correlação de acordo com (5.12) e (5.13).

Aplicando a definição da concurrência C, dada no capítulo 2, à matriz densidade (5.11), é fácil mostrar que:

$$C_{ij}(T) = 2\max(0, |z| - \sqrt{u^+ u^-}). \tag{5.17}$$

Agora, explorando o fato do sistema ser isotrópico, quando não há campo externo aplicado, é possível considerar $\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle = G_{ij}/3$ e $\langle S_i^x S_j^y \rangle = \langle S_i^y S_j^x \rangle$. Portanto, é possível descrever a concurrência entre os pares i e j em termos das funções de correlação: $C_{ij}(T) = \frac{2}{3}\max(0, 2|G_{ij}| - G_{ij} - \frac{3}{4})$. É fácil verificar a partir de (5.1) que $\bar{\chi}_{ij}^{exp}(T) = 2(g\mu_B)^2(1/4 + G_{ij}/3)/k_B T$ e portanto a concurrência se torna:

$$C_{ij}(T) = \frac{k_B T}{(g\mu_B)^2} \max\left(0, 2\left|\bar{\chi}_{ij}^{exp}(T) - \frac{(g\mu_B)^2}{2k_B T}\right| - \bar{\chi}_{ij}^{exp}(T)\right) \tag{5.18}$$

A equação (5.18) relaciona a concurrência do par $i-j$, e portanto o emaranhamento de formação EF, à susceptibilidade magnética $\bar{\chi}_{ij}^{exp}(T)$, que pode ser obtida a partir dos dados experimentais como explicado anteriormente. É interessante notar que a equação (5.18) leva à concurrência calculada por Asoudeh e Karimipour [190], utilizando aproximações de campo médio, para clusters de spins. (ver equação (16) de [190]).

Na figura (5.6), mostramos o emaranhamento da formação experimental obtido da medida da susceptibilidade magnética e o emaranhamento da formação calculado com a matriz densidade reduzida $\rho_{ij}(T)$ para os pares pertencentes ao trímero (1−2,2−3 e 1−3). Podemos ver que há emaranhamento entre os spins dos pares $1-2$ e $2-3$, que persiste até a temperatura crítica $T^c \sim 200$ K. O emaranhamento da formação para os outros pares é sempre nulo e por isso não é mostrado. Estes resultados confirmam que apenas o trímero possui emaranhamento. Uma característica interessante é que a temperatura crítica obtida da testemunha de emaranhamento referente ao trímero $EW(3)$ é $T^c \sim 240$ K enquanto que T^c obtida do emaranhamento da formação é ~ 200 K. Como EF pode apenas detectar emaranhamento de pares, este resultado indica que o emaranhamento de pares não é o único tipo de emaranhamento presente no sistema, o emaranhamento de três spins também pode estar presente.

Uma vez estabelecida a presença de emaranhamento entre três spins, é interessante perguntar se este emaranhamento tripartido é genuíno ou não. O emaranhamento de k partículas é dito genuíno se o estado do sistema não for um estado produto de $k-1$ termos. Em outras palavras, a matriz densidade de um trio de partículas com emaranhamento genuíno não pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\rho_{ABC} &= \sum_n p_n \rho^n_{AB} \otimes \rho^n_C, \\
\rho_{ABC} &= \sum_n p_n \rho^n_{AC} \otimes \rho^n_B, \quad \text{ou} \\
\rho_{ABC} &= \sum_n p_n \rho^n_{A} \otimes \rho^n_{BC}.
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Emaranhamento multipartido genuíno pode ser identificado pelo critério descrito em [184]. Aplicado ao trímero, o critério estabelece que se a expressão $\langle \mathcal{H}_{Tri} \rangle < J_1(1+\sqrt{5})/4$ for válida, onde $\langle \mathcal{H}_{Tri} \rangle$ é o valor médio da energia correspondente apenas à parte do trímero, então o emaranhamento tripartido é genuíno. Calculamos numericamente, a partir da matriz densidade do trímero, a temperatura limite abaixo da qual emaranhamento tripartido existe. Foi encontrado que a temperatura limite é ~ 108 K, o que sugere que o composto possui emaranhamento tripartido genuíno a temperatura finita.

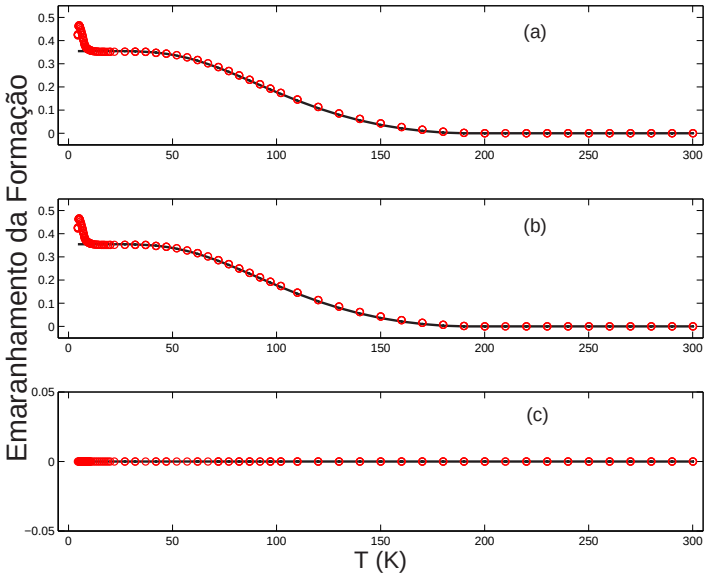


Figura 5.6: Emaranhamento da formação determinado experimentalmente no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. (a) para o par $1-2$, (b) para o par $2-3$ e (c) para o par $1-3$. A linha sólida é a previsão teórica. O pequeno desvio entre a teoria e o experimento a baixas temperaturas está associado a uma transição do material para a fase 3D.

5.4.2 O efeito do campo magnético

Para investigar o efeito da aplicação de um campo magnético, o emaranhamento da formação foi calculado para cada par de spins. Nas figuras (5.7) e (5.8), mostramos EF para os três pares de spin do trímero. O comportamento do emaranhamento dos pares $1-2$ e $2-3$ é idêntico. Em baixas temperatura, a aplicação de um campo magnético baixo aumenta a quantidade de emaranhamento em ambos os pares e também cria uma pequena quantidade de emaranhamento no par $1-3$, que não existia antes do campo aplicado. Comportamento similar também foi encontrado em outros trabalhos teóricos [6, 190] e pode ser entendido em termos de mudanças no estado fundamental do sistema. Quando $H = 0$, o estado fundamental do sistema possui emaranhamento apenas entre os pares $1-2$ e $2-3$. A aplicação de um campo externo muda as autoenergias da Hamiltoniana (5.10), mudando o estado fundamental para outro estado com grau de emaranhamento diferente. Para altos campos magnéticos, o estado fundamental se torna $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$, que coresponde a situação em que todos os spins estão alinhados com o campo externo. A baixas temperaturas, onde o estado fundamental é muito populado, EF decai abruptamente perto de ~ 2200 kOe devido a mudança repentina do estado fundamental

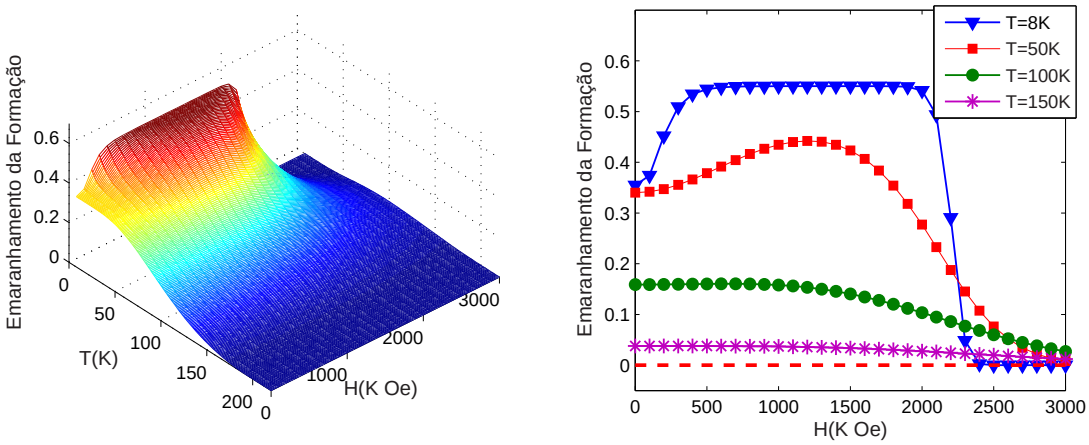


Figura 5.7: (a) Emaranhamento da formação para os pares $1-2$ e $2-3$ em função da temperatura e campo aplicado. (b) Emaranhamento da formação em função do campo aplicado, para algumas temperaturas selecionadas.

para $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$. Entretanto, para altas temperaturas, há muitos outros estados populados e o decaimento do emaranhamento é suave.

A partir do diagrama $H-T$ mostrados nas figuras (5.7) e (5.8), podemos observar também que o emaranhamento de pares não ocorre acima da temperatura crítica $T^c \sim 200$ K e acima do campo crítico $H^c \sim 3000$ kOe. Uma característica interessante é que o campo crítico H^c é muito maior que as intensidades dos campos que usualmente podem ser aplicados nos laboratórios, indicando que o emaranhamento neste sistema não pode ser destruído por campos usuais de laboratório para temperaturas abaixo de 200 K, supondo que altos campos não induzam mudanças estruturais no composto, e não alterem também os mecanismos de interação entre os spins. O emaranhamento da formação para os outros pares de spin são sempre nulos em qualquer ponto do diagrama $H-T$ e por isso não são mostrados.

5.5 Conclusões

Em resumo, a presença do emaranhamento térmico foi estabelecida no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. A partir dos resultados obtidos, podemos concluir que o emaranhamento observado é robusto, pois desaparece apenas em altas temperaturas e altos campos. Quando o campo aplicado é nulo, encontramos experimentalmente que o emaranhamento de pares existe abaixo de ~ 200 K e que o sistema também possui emaranhamento tri-

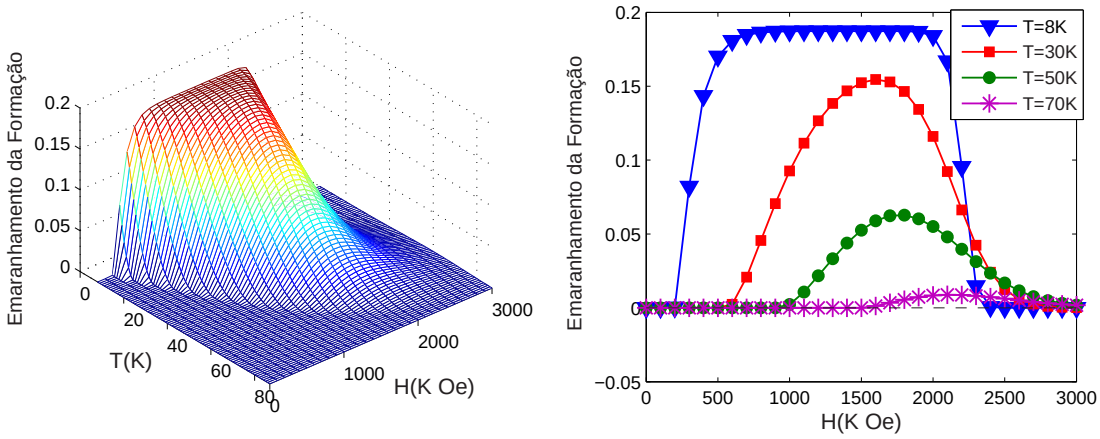


Figura 5.8: (a) Emaranhamento da formação para o par $1-3$, em função da temperatura e campo aplicado. (b) Emaranhamento da formação em função do campo aplicado, para algumas temperaturas selecionadas.

partido abaixo de ~ 240 K. Estes resultados mostram que o emaranhamento tripartido é mais robusto que o emaranhamento de pares no nosso caso. A mesma característica também foi verificada experimentalmente no composto $Na_2V_3O_7$ [196]. É importante enfatizar que há emaranhamento apenas entre os spins do trímero, portanto este emaranhamento não é macroscópico. Também apresentamos um estudo teórico da evolução do emaranhamento em função do campo aplicado e da temperatura, este estudo mostrou que o campo magnético pode aumentar o grau do emaranhamento entre os pares $1-2$, $2-3$ e $1-3$.

Devemos enfatizar que alguns resultados são baseados na validade do modelo dímero-trímero. Entretanto, este modelo se mostrou um bom modelo para o presente sistema (ver figura (5.4)). Além disso, como a testemunha de emaranhamento $EW(5)$ não depende de qualquer hipótese feita sobre o modelo ou dos valores explícitos das integrais de troca, mesmo que o modelo dímero-trímero não esteja completamente correto, a conclusão principal deste trabalho não será alterada. Isto é: há emaranhamento térmico no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$.

6

Conclusões e perspectivas

No primeiro trabalho que compõe esta tese, desenvolvemos um método para simular experimentos de ótica, onde os spins nucleares fazem o papel dos fótons e suas possíveis orientações em relação ao campo magnético aplicado fazem o papel das polarizações dos campos elétricos dos fótons.

Para ilustrar o método, realizamos um experimento de RMN, onde estudamos a violação da desigualdade de Clauser, Horne, Shimony e Holt utilizando um sistema de spins nucleares de dois q-bits. A fidelidade da simulação foi testada através da comparação entre nossos resultados e os resultados de um dos famosos experimentos realizados com fótons pelo grupo de A. Aspect na década de 80 [9]. Também mostramos que o mesmo conjunto de dados experimentais pode ser explicado tanto pela mecânica quântica quanto pelo modelo de variáveis ocultas proposto para RMN por Menicucci e Caves [10]. A consistência entre ambas teorias pode ser compreendida lembrando que apenas uma pequena fração dos spins é detectada, uma situação semelhante à fuga de detecção, que também acontece nos experimentos de ótica.

A fuga da detecção ocorre quando e eficiência de detecção das partículas emaranhadas é baixa. Imperfeições no aparato experimental sempre fazem com que apenas um pequeno subconjunto do total de partículas seja efetivamente detectado. Em princípio, este subconjunto poderia conter uma distribuição de variáveis ocultas diferentes do conjunto total. Assim é possível que o subconjunto de eventos detectados viole alguma desigualdade de Bell, mesmo que o conjunto total de eventos não viole. Neste caso, poderia se dizer que o subconjunto simularia a violação da desigualdade de Bell. Para contornar este problema, geralmente utiliza-se a hipótese de amostragem justa, ou seja, a hipótese de que o *subensemble* detectado representa fielmente todo o sistema. No caso

da RMN, não podemos evocar tal hipótese, uma vez que os spins não detectados estão no estado completamente misturado e não no estado emaranhado desejado. Portanto nos referimos ao nosso experimento como uma simulação. Até onde sabemos, esta foi a primeira vez que um modelo de variáveis ocultas foi explicitamente comparado com dados experimentais.

Dois pontos importantes, referentes a este experimento, devem ser enfatizados. O primeiro é o fato que os q-bits em RMN são spins nucleares de átomos em uma molécula, separados por poucos angstrons. Portanto, um experimento de RMN é inerentemente local e não pode ser utilizado para provar efeitos não-locais. Além disso, o experimento foi realizado a temperatura ambiente em uma amostra líquida macroscópica, contendo um número muito grande de moléculas. Nesta situação, o *ensemble* de spins constitui uma mistura estatística e sua matriz densidade não representa um sistema emaranhado. Portanto, este trabalho não prova efeitos não-locais. O segundo ponto que devemos enfatizar é que o modelo de Menicucci e Caves é válido apenas para experimentos de RMN que acessam estado separáveis, e não para os experimentos realizados com fótons. Assim, apesar dos resultados do experimento com fótons e spins nucleares praticamente coincidirem, apenas os dados de RMN podem ser explicados com o modelo realístico-local.

As perspectivas para esta linha de pesquisa são bastante promissoras. A primeira perspectiva é estudar as desigualdades de Bell em sistemas de RMN com spins altamente polarizados. Nesta situação, estados genuinamente emaranhados podem ser obtidos e uma forte discrepância entre a mecânica quântica e modelos de variáveis ocultas é esperada. Particularmente interessante para a RMN são aquelas desigualdades construídas para testar o realismo, e que não fazem uso da hipótese da localidade. Igualmente interessantes são as desigualdades que não precisam de emaranhamento, tal como a desigualdade temporal de Bell.

Outra perspectiva interessante é utilizar o método desenvolvido aqui para simular resultados de diferentes desigualdades de Bell, com configurações distintas e que não são triviais de serem realizadas com outras técnicas. Testar tais desigualdades de Bell não é apenas importante no contexto do problema de variáveis ocultas. Um exemplo de aplicação interessante das desigualdades de Bell, que não está relacionado com os fundamentos da mecânica quântica, é apresentada por Pál e Vertési [175]. Neste trabalho, foi demonstrado que existem desigualdades de Bell que podem ser utilizadas como "testemunhas de dimensão", ou seja, quantidades que permitem a determinação experimental

da dimensionalidade do sistema.

Por fim, devemos mencionar que estudos das desigualdades de Bell têm sido pouco explorados experimentalmente fora do contexto da ótica. Entretanto, acreditamos que a habilidade de criar estados verdadeiramente emaranhados em *ensembles* de spins polarizados aliada ao alto grau de controle da RMN cria possibilidades que podem ser de grande utilidade tanto para demonstrações de computação quântica quanto para o estudo de fundamentos da mecânica quântica.

O segundo trabalho que compõe esta tese é um estudo sobre o emaranhamento térmico em uma cadeia de spins formada no composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. A presença do emaranhamento foi investigada através de duas quantidades, uma testemunha de emaranhamento e o emaranhamento da formação, ambas derivadas da susceptibilidade magnética. Além da observação experimental do emaranhamento pela susceptibilidade magnética, também realizamos um estudo teórico sobre o comportamento do emaranhamento em função do campo aplicado e também da temperatura.

Quando o campo aplicado é nulo, encontramos experimentalmente que o emaranhamento de pares existe abaixo de ~ 200 K e que o sistema também possui emaranhamento tripartido abaixo de ~ 240 K. Estes resultados mostram que o emaranhamento tripartido é mais robusto que o emaranhamento de pares, pelo menos no sistema estudado. A mesma característica também foi verificada experimentalmente no composto $Na_2V_3O_7$ [196].

O estudo teórico da evolução do emaranhamento em função do campo aplicado e da temperatura mostrou que o campo magnético pode aumentar o grau do emaranhamento entre os pares $1-2$, $2-3$ e $1-3$. Também podemos observar que o emaranhamento de pares não ocorre acima da temperatura crítica $T^c \sim 200$ K e acima do campo crítico $H^c \sim 3000$ kOe. Uma característica interessante é que o campo crítico H^c é muito maior que as intensidades dos campos que usualmente podem ser aplicados nos laboratórios. Isto indica que o emaranhamento neste sistema não pode ser destruído por campos usuais de laboratório para temperaturas abaixo de 200 K, supondo que altos campos não induzam mudanças estruturais no composto, e não alterem também os mecanismos de interação entre os spins.

A extensão mais simples para este trabalho consiste em estudar o emaranhamento em outros compostos. O estudo do emaranhamento térmico tem atraído grande atenção da comunidade científica, fato que pode ser evidenciado no crescente número de artigos

publicados recentemente na literatura. No entanto, poucos trabalhos experimentais têm sido apresentados. Uma interessante questão em aberto, e que poderia ser um tema para futuros trabalhos teóricos e experimentais, é investigar se o emaranhamento pode estar relacionado com propriedades físicas do material. Uma evidência de que o emaranhamento é importante para o entendimento da física dos sólidos está presente no trabalho de Ghosh *et al.* [7], onde foi demonstrado que o emaranhamento é o ingrediente fundamental para a explicação do comportamento da susceptibilidade magnética no composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$ a baixas temperaturas. Outra questão interessante é a conexão entre o emaranhamento e a entropia não-extensiva de Tsallis [210]. Assim como o emaranhamento, a não-extensividade está relacionada com correlações entre constituintes do sistema. Portanto, as duas propriedades podem estar conectadas. Porém, está conexão não é obvia e poucos trabalhos têm explorado o tema [211–215].

Também há a possibilidade de usar materiais como reservatórios de emaranhamento. A idéia central é construir um material que possua naturalmente o estado emaranhado desejado − este poderia ser o estado fundamental do sistema, por exemplo − e depois extraí-lo do material. O emaranhamento extraído poderia ser utilizado para realizar tarefas de computação ou ser empregado em protocolos quânticos de comunicação e criptografia. Este procedimento é análogo ao da extração da energia de um reservatório térmico para a realização de trabalho.

Em resumo, esta tese é constituída de dois trabalhos distintos, mas que envolvem o estudo do mesmo fenômeno físico, conhecido como emaranhamento. Nestes dois trabalhos, experimentos foram realizados utilizando a técnica de ressonância magnética nuclear e também medidas de susceptibilidade magnética. Os resultados experimentais foram amplamente comparados com as devidas previsões teóricas, obtidas de modelos − como foi o caso das variáveis ocultas −, e também da Mecânica Quântica. Como pôde ser constatado, os resultados experimentais se encontram de acordo com as previsões teóricas, e com isso foi possível respaldar as conclusões discutidas no início deste capítulo.

Acreditamos que os trabalhos abordados nesta tese possam ser os precursores de muitos outros, ainda tratando do mesmo fenômeno físico, o emaranhamento, que é um dos mais fascinantes temas da física neste século.

APÊNDICE A – Portas lógicas quânticas

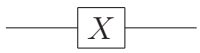
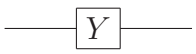
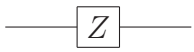
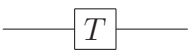
Nome	Circuito Quântico	Representação Matricial	Seqüência de Pulsos
Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$	$(\pi/2)^y - (\pi)^x$
NOT ou Porta X		$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$(\pi)^x$
Porta Y		$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$(\pi)^y$
Porta Z		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$(-\pi/2)^x - (\pi)^y - (\pi/2)^x$
Porta de fase		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$	$(-\pi/2)^x - (\theta)^y - (\pi/2)^x$
Porta S		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$	$(-\pi/2)^x - (\pi/2)^y - (\pi/2)^x$
Porta T		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}$	$(-\pi/2)^x - (\pi/4)^y - (\pi/2)^x$

Tabela A.1: Definições das principais portas de um q-bit.

Porta Hadamard

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$(\|0\rangle + \|1\rangle)/\sqrt{2}$
$\|1\rangle$	$(\|0\rangle - \|1\rangle)/\sqrt{2}$

Porta NOT

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$\|1\rangle$
$\|1\rangle$	$\|0\rangle$

Porta Y

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$i\|1\rangle$
$\|1\rangle$	$-i\|0\rangle$

Porta Z

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$\|0\rangle$
$\|1\rangle$	$-\|1\rangle$

Porta S

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$\|0\rangle$
$\|1\rangle$	$i\|1\rangle$

Porta T

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$\|0\rangle$
$\|1\rangle$	$e^{i\pi/4}\|1\rangle$

Porta de fase

Entrada	Saída
$\|0\rangle$	$\|0\rangle$
$\|1\rangle$	$e^{i\theta}\|1\rangle$

Tabela A.2: Tabelas verdade das principais portas de um q-bit.

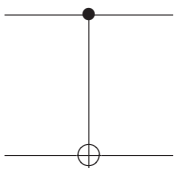
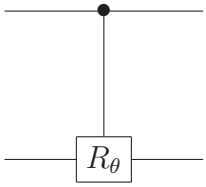
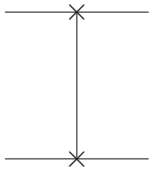
Nome	Circuito Quântico	Representação Matricial	Seqüência de Pulsos
CNOT		$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$(\pi/2)_2^y - U_J(1/2J) - (\pi/2)_2^x$ $(-\pi/2)_2^x - (-\pi)_2^y - (\pi/2)_2^x$ $(-\pi/2)_2^x - (\pi)_2^y - (\pi/2)_2^x$
Porta de fase controlada		$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$	$(\pi)_1^\phi - U_J(\theta/2\pi J) - (\pi)_1^\phi$ $(\pi/2)_{1,2}^y - (\theta/2)_{1,2}^x - (\pi/2)_{1,2}^{-y}$
Troca		$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$(\pi/2)_{1,2}^y - U_J(1/2J) - (\pi/2)_{1,2}^{-y}$ $U_J(1/2J) - (\pi/2)_{1,2}^x - U_J(1/2J) -$ $(\pi/2)_{1,2}^{-x}$

Tabela A.3: Definições das principais portas de dois q-bits. A fase ϕ que aparece na seqüência de implementação da porta de fase controlada é uma fase arbitrária.

Porta CNOT	
Entrada	Saída
$\|00\rangle$	$\|00\rangle$
$\|01\rangle$	$\|01\rangle$
$\|10\rangle$	$\|11\rangle$
$\|11\rangle$	$\|10\rangle$

Porta de Fase Controlada	
Entrada	Saída
$\|00\rangle$	$\|00\rangle$
$\|01\rangle$	$\|01\rangle$
$\|10\rangle$	$\|10\rangle$
$\|11\rangle$	$e^{i\phi}\|11\rangle$

Porta de Troca	
Entrada	Saída
$\|00\rangle$	$\|00\rangle$
$\|01\rangle$	$\|10\rangle$
$\|10\rangle$	$\|01\rangle$
$\|11\rangle$	$\|11\rangle$

Tabela A.4: Tabelas verdade das principais portas de dois q-bits.

APÊNDICE B – Referencial múltiplo girante

A evolução de um spin submetido a um campo magnético externo e a um pulso de RF é extremamente complexa quando descrita no referencial de laboratório. Para simplificar o problema, utilizamos o referencial girante, que é um sistema de coordenadas que gira com freqüência angular ω^{rf} igual a freqüência da RF aplicada. A conexão entre o estado de um spin no referencial girante $|\psi\rangle_{rot}$ e no referencial de laboratório $|\psi\rangle_{lab}$ é dada por:

$$|\psi\rangle_{rot} = e^{-i\omega^{rf}t\sigma^z/2}|\psi\rangle_{lab}. \tag{B.1}$$

Em sistemas que possuem N spins, um referencial girante pode ser definido para cada spin. Isto é o que chamamos de referencial múltiplo girante. Assim, a extensão de (B.1) é dada por:

$$|\psi\rangle_{rot} = \prod_{k=1}^{N} e^{-i\omega_k^{rf}t\sigma_k^z/2}|\psi\rangle = U_t|\psi\rangle_{lab}, \tag{B.2}$$

onde

$$U_t = \prod_{k=1}^{N} e^{-i\omega_k^{rf}t\sigma_k^z/2} = e^{-i\sum_k \omega_k^{rf}t\sigma_k^z/2}. \tag{B.3}$$

Substituindo (B.2) na equação de Schrödinger [158], temos:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{lab} = \mathcal{H}_{lab}|\psi\rangle_{lab} \tag{B.4}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_t^\dagger|\psi\rangle_{rot} = \mathcal{H}_{lab}U_t^\dagger|\psi\rangle_{rot} \tag{B.5}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{rot} = U_t\mathcal{H}_{lab}U_t^\dagger|\psi\rangle_{rot} + \hbar\sum_k\frac{\sigma_k^z\omega_k^{rf}}{2}|\psi\rangle_{rot} \tag{B.6}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{rot} = \left[U_t\mathcal{H}_{lab}U_t^\dagger + \hbar\sum_k\frac{\sigma_k^z\omega_k^{rf}}{2}\right]|\psi\rangle_{rot} \tag{B.7}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{rot} = \mathcal{H}_{rot}|\psi\rangle_{rot}, \tag{B.8}$$

onde

$$\mathcal{H}_{rot} = U_t\mathcal{H}_{lab}U_t^\dagger + \hbar\sum_k\frac{\sigma_k^z\omega_k^{rf}}{2} \tag{B.9}$$

é a Hamiltoniana do sistema de spins escrita no referencial múltiplo girante e $\mathcal{H}_{lab}$ é a Hamiltoniana escrita no referencial de laboratório. Para os sistemas líquidos de RMN estudados nesta tese, a Hamiltoniana no referencial de laboratório é dada por:

$$\mathcal{H}_{lab} = \mathcal{H}_Z + \mathcal{H}_J + \mathcal{H}_{RF}, \tag{B.10}$$

onde o termo $\mathcal{H}_Z$ descreve a interação dos spins com o campo magnético estático, $\mathcal{H}_J$ descreve a interação de troca entre os spins e $\mathcal{H}_{RF}$ descreve a interação dos spins com campos de radiofreqüências. A situação mais geral que podemos encontrar consiste de N spins submetidos a R campos de RF, neste caso temos:

$$\mathcal{H}_Z = -\hbar\sum_k^N\omega_k\frac{\sigma_k^z}{2}, \tag{B.11}$$

$$\mathcal{H}_J = 2\pi\hbar\sum_{j,k}J_{jk}\frac{\sigma_j^z\sigma_k^z}{4} \text{ e} \tag{B.12}$$

$$\mathcal{H}_{RF} = -\hbar\sum_r^R\sum_k^N\omega_{1,r}\left[cos(\omega_r^{rf}t+\phi_r)\frac{\sigma_k^x}{2} - sin(\omega_r^{rf}t+\phi_r)\frac{\sigma_k^y}{2}\right]. \tag{B.13}$$

Como $\mathcal{H}_Z$ e $\mathcal{H}_J$ comutam com U_t, temos que $U_t\mathcal{H}_ZU_t^\dagger = \mathcal{H}_Z$ e $U_t\mathcal{H}_JU_t^\dagger = \mathcal{H}_J$. Para calcular $U_t\mathcal{H}_{RF}U_t^\dagger$, utilizamos a seguinte relação matemática:

$$e^{i\theta\sum_k\sigma_k^z/2}\left(\sum_j\sigma_j^x\right)e^{-i\theta\sum_k\sigma_k^z/2} = \sum_k cos(\theta)\sigma_k^x - sin(\theta)\sigma_k^y. \tag{B.14}$$

Desta maneira podemos reescrever (B.13) como:

$$\mathcal{H}_{RF} = -\hbar \sum_{r}^{R} \omega_{1,r} \left[e^{i(\omega_r^{rf} t + \phi_r) \sum_k \sigma_k^z/2} \left(\sum_j \frac{\sigma_j^x}{2} \right) e^{-i(\omega_r^{rf} t + \phi_r) \sum_k \sigma_k^z/2} \right]. \tag{B.15}$$

Com a Hamiltoniana $\mathcal{H}_{RF}$ escrita nesta forma, é fácil mostrar que

$$\begin{aligned} U_t \mathcal{H}_{RF} U_t^\dagger &= -\hbar \sum_{r}^{R} \omega_{1,r} e^{i \sum_k [((\omega_r^{rf} - \omega_k)t + \phi_r)\sigma_k^z/2]} \left(\sum_j \frac{\sigma_j^x}{2} \right) \\ &\quad e^{-i \sum_k [((\omega_r^{rf} - \omega_k)t + \phi_r)\sigma_k^z/2]} \qquad \text{(B.16)} \\ &= -\hbar \sum_{r}^{R} \sum_{k}^{N} \omega_{1,r} [cos((\omega_r^{rf} - \omega_k)t + \phi_r) \frac{\sigma_k^x}{2} \\ &\quad -sin((\omega_r^{rf} - \omega_k)t + \phi_r) \frac{\sigma_k^y}{2}] \qquad \text{(B.17)} \end{aligned}$$

e portanto

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{rot} &= \hbar \sum_k (\omega_k^{rf} - \omega_k) \frac{\sigma_k^z}{2} + 2\pi\hbar \sum_{j,k} J_{jk} \frac{\sigma_j^z \sigma_k^z}{4} \\ &- \hbar \sum_{r,k} \omega_{1,r} [cos((\omega_r^{rf} - \omega_k)t + \phi_r) \frac{\sigma_k^x}{2} - sin((\omega_r^{rf} - \omega_k)t + \phi_r) \frac{\sigma_k^y}{2}]. \end{aligned} \tag{B.18}$$

A Hamiltoniana (B.18) descreve a evolução de N spins submetidos a uma campo magnético estático e a R campos de radiofreqüência no referencial múltiplo girante. O caso mais simples, e mais explorado nos livros básicos de RMN, corresponde a situação em que temos um spin ($k = 1$) sujeito a um único campo de RF ($r = 1$). Se o pulso de RF for aplicado na ressonância do spin, (B.18) pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_{rot} = -\hbar\omega_1 \left[cos(\phi) \frac{\sigma^x}{2} - sin(\phi) \frac{\sigma^y}{2} \right] \tag{B.19}$$

A equação (B.19) é a Hamiltoniana que vai dar origem a expressão (4.7), que aparece na seção 4.1.2, e gera as portas unitárias de um qbit. No caso do clorofórmio ($k = 2$ e $r = 2$), pode se mostrar que:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{rot} &= 2\pi\hbar J \frac{\sigma_I^z \sigma_S^z}{4} - \hbar\omega_{1,I} \left[cos(\phi_I) \frac{\sigma_I^x}{2} - sin(\phi_I) \frac{\sigma_I^y}{2} \right] \\ &\quad -\hbar\omega_{1,S} \left[cos(\phi_S) \frac{\sigma_S^x}{2} - sin(\phi_S) \frac{\sigma_S^y}{2} \right]. \end{aligned} \tag{B.20}$$

Para pulsos de RF cuja duração é da ordem de microsegundos, temos que $2\pi Jt \sim 0$ e (B.20) se reduz a:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{rot} &= -\hbar\omega_{1,I}\left[cos(\phi_I)\frac{\sigma_I^x}{2} - sin(\phi_I)\frac{\sigma_I^y}{2}\right] \\ &\quad -\hbar\omega_{1,S}\left[cos(\phi_S)\frac{\sigma_S^x}{2} - sin(\phi_S)\frac{\sigma_S^y}{2}\right] \end{aligned} \tag{B.21}$$

Esta Hamiltoniana gera operações lógicas do tipo $e^{-i\mathcal{H}_{rot}t/\hbar} = R_I(\hat{n}_{\phi_I}, \theta_I = \omega_{1,I}t) \otimes R_S(\hat{n}_{\phi_S}, \theta_S = \omega_{1,S}t)$. Quando não há campo aplicado, a Hamiltoniana no referencial girante é dada por:

$$\mathcal{H}_{rot} = 2\pi\hbar J\frac{\sigma_I^z\sigma_S^z}{4}. \tag{B.22}$$

Esta Hamiltoniana gera a operação lógica $U_J(t)$, introduzida na seção 4.1.2, e necessária para se construir portas controladas.

APÊNDICE C – Programas em MATLAB

C.1 Programas de simulação com a mecânica quântica

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                          CLOROSIM :)                                    %
%     Simula experimentos de CQ no clorofórmio utilizando a MQ            %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function [struc roh] = clorosim(pps,gate,typsim,ntomo)

cloropar;

global typ roh

roh =roheq;   typ =typsim;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Criaçao do PPS |00> %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
pph(p1,ph1);   ppc(p2,ph1);

delay(1/(4*J12));

pph(p1,ph2);   ppc(p2,ph2);

delay(1/(4*J12));

pph(p1,ph3);   ppc(p2,ph3);

```

```
0025 roh = diag(diag(roh));
0026
0027 pph(p1/2,ph2);     ppc(p2/2,ph2);
0028
0029 delay(1/(2*J12));
0030
0031 pph(0.3333*p1,ph1); ppc(0.3333*p2,ph1);
0032
0033 roh = diag(diag(roh));
0034
0035 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Criaçao de outros PPS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0036
0037 if pps == 0;      end;
0038
0039 if pps == 1;    ppc(2*p2,ph1);  end
0040
0041 if pps == 2;    pph(2*p1,ph1);  end
0042
0043 if pps == 3;    ppc(2*p2,ph1);  pph(2*p1,ph1);  end
0044
0045 if gate == 1;
0046        ppc(p2,ph2);     pph(p1,ph3);
0047        delay(1/(2*J12));
0048        pph(p1,ph1);     ppc(p2,ph4);
0049 end
0050
0051 if gate == 2
0052        ppc(p2,ph2);  pph(p1,ph2);
0053 end
0054
0055 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Pulos de Tomografia %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0056
0057 rohaux = roh;
0058
```

```
0059 if nargin == 3; ntomo = 1:9; end
0060
0061 for m = 1:length(ntomo);
0062
0063 k = ntomo(m);
0064
0065 if k==1;  end
0066
0067 if k==2; ppc(p2,ph1);  end
0068
0069 if k==3; ppc(p2,ph2);  end
0070
0071 if k==4; pph(p1,ph1);  end
0072
0073 if k==5; pph(p1,ph1);  ppc(p2,ph1);  end
0074
0075 if k==6; pph(p1,ph1);  ppc(p2,ph2);  end
0076
0077 if k==7; pph(p1,ph2);  end
0078
0079 if k==8; pph(p1,ph2);  ppc(p2,ph1);  end
0080
0081 if k==9; pph(p1,ph2);  ppc(p2,ph2);  end
0082
0083
0084 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FID %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0085
0086 [struc.h(m).fid  struc.c(m).fid] = fidgen(roh);
0087
0088 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Espectro %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0089
0090 struc.h(m).esp = fftshift(fft(struc.h(m).fid,nesph));
0091
0092 struc.c(m).esp = fftshift(fft(struc.c(m).fid,nespc));
```

```
0093
0094 struc.h(m).par.sw = swh;
0095
0096 struc.c(m).par.sw = swc;
0097
0098 roh = rohaux;
0099
0100 end
0101
0102 %%%%%%%%%%%%%%%%%% Normaliza Matriz Densidade %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0103
0104 f = (1+gh/gc)*sqrt(3/2)*epsi/8;
0105
0106 roh = (roh - eye(4)/4)/f;

0001
0002 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0003 %               Definiçao dos parâmetros da simulaçao                        %
0004 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0005
0006
0007 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  OPERADORES %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0008
0009 global Ix Iy Mop1 Mop2
0010
0011 [I1 I2 I3] = mat_Ixyz(1/2);              Ind = eye(2);
0012
0013 Ix{1} = kron(I1,Ind);                     Ix{2} = kron(Ind,I1);
0014
0015 Iy{1} = kron(I2,Ind);                     Iy{2} = kron(Ind,I2);
0016
0017 Iz{1} = kron(I3,Ind);                     Iz{2} = kron(Ind,I3);
0018
0019 Mop1 = i*Ix{1} - Iy{1};                  Mop2 =  i*Ix{2} - Iy{2};
0020
```

```
0021 %%%%%%%%%%%%%%%%%%  HAMILTONIANA E MATRIZ DENSIDADE INICIAL %%%%%%%%%%%%%
0022
0023 global H T2 gh gc T1 pol1 pol2
0024
0025 B0 =10;           epsi  = 10^-5; J12 = 210.16;
0026
0027 gh = 26.7520e7;   woh = B0*gh;   wrfh = woh;   T2(1) = 0.6;    T1(1) = 6;
0028
0029 gc = 6.7283e7;    woc = B0*gc;   wrfc = woc;   T2(2) = 0.4;    T1(2) = 15;
0030
0031 H = (wrfh - woh)*Iz{1} + (wrfc - woc)*Iz{2} + 2*pi*J12*Iz{1}*Iz{2};
0032
0033 roheq = ( eye(4) +  epsi * ((gh/gc)*Iz{1} + Iz{2}) )/4;
0034
0035 pol = ztrace(roheq,2); pol1 = pol(1,1);
0036
0037 pol = ztrace(roheq,1); pol2 = pol(1,1);
0038
0039 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% PARÂMETROS DOS PULSOS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0040 global wr typdel
0041
0042 typdel = 0;
0043
0044 p1 = 10e-6;                    p2 = 10e-6;          %(Tempo em segundos)
0045
0046 wr(1) = (pi/2)/p1;             wr(2) = (pi/2)/p2;
0047
0048 ph1 = 0;       % FASE EM X
0049
0050 ph2 = pi/2;    % FASE EM Y
0051
0052 ph3 = pi;      % FASE EM -X
0053
0054 ph4 = 3*pi/2;  % FASE EM -Y
```

```
0055
0056 %%%%%%%%%%%%% PARÂMETROS DO FID E DO ESPECTRO %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0057 global th tc dth dtc
0058
0059 nfidh = 4*1024;  nesph = 4*1024;  swh = 1200.4;   dth =1/swh;
0060
0061 nfidc = 4*1024;  nespc = 4*1024;  swc = 1000;     dtc =1/swc;
0062
0063 th = (0:nfidh-1)*dth;
0064
0065 frh = (1/dth)*(0:nesph-1)/nesph - swh/2;
0066
0067 tc = (0:nfidc-1)*dtc;
0068
0069 frc = (1/dtc)*(0:nespc-1)/nespc - swc/2;
```

```
0001 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0002 %     Programa para Simular a Aplicaçao de um pulso de RF no Hidrogênio   %
0003 %     Typsim = 1 (Simula o pulso sem descoerencia)                        %
0004 %     Typsim = 2 (Simula o pulso com descoerencia)                        %
0005 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0006 function pph(tp,ph);
0007
0008 global roh wr H Ix Iy typ typdel
0009
0010 if typ == 1;
0011     U = expm(-i*(H + wr(1)*(cos(ph)*Ix{1} + sin(ph)*Iy{1}) )*tp);
0012 end
0013
0014 if typ == 2;
0015
0016     U = expm( -i * tp*wr(1) * (cos(ph)*Ix{1} + sin(ph)*Iy{1}) );
0017
0018     typdel = 1;
0019
```

```
0020     delay(tp);
0021 end
0022
0023 roh = U*roh*U';

0001 function  ppc(tp,ph);
0002 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0003 %     Programa para Simular a Aplicaçao de um pulso de RF no Carbono      %
0004 %     Typsim = 1 (Simula o pulso sem descoerencia)                        %
0005 %     Typsim = 2 (Simula o pulso com descoerencia)                        %
0006 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0007
0008 global roh wr H Ix Iy typ typdel
0009
0010 if typ == 1;
0011
0012     U = expm(-i*(H + wr(2)*( cos(ph)*Ix{2} + sin(ph)*Iy{2} ) )*tp);
0013
0014 end
0015
0016
0017 if typ == 2;
0018
0019     U = expm( -i * tp*wr(2) * (cos(ph)*Ix{2} + sin(ph)*Iy{2}) );
0020
0021     typdel =1;
0022
0023     delay(tp);
0024
0025 end
0026
0027     roh = U*roh*U';

0001 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0002 %     Programa para Simular um Delay                                      %
```

```
0003 %     Typsim = 1 (Simula o Delay sem descoerencia)                    %
0004 %     Typsim = 2 (Simula o Delay com descoerencia)                    %
0005 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0006
0007 function delay(td)
0008
0009 global H typ roh T1 T2 pol1 pol2 typdel
0010
0011 if typ == 1; U =  expm(-i*H*td); roh = U*roh*U'; end
0012
0013 if typ == 2;
0014     np =1;   dt = td/np;  U = expm(-i*H*dt);  p = [pol1 pol2];
0015
0016 for k=1:2;
0017     g(k) = 1 - exp(-dt/T1(k));
0018
0019     E1{k} = kron(kron( eye(2^(k-1)), sqrt(p(k))*[1 0; 0 sqrt(1-g(k))]) ...
0020         , eye(2^(2-k)));
0021     E2{k} = kron(kron( eye(2^(k-1)), sqrt(p(k))*[0 sqrt(g(k)); 0 0]) ...
0022         , eye(2^(2-k)));
0023     E3{k} = kron(kron( eye(2^(k-1)), sqrt(1-p(k))*[sqrt(1-g(k)) 0; 0 1])...
0024         , eye(2^(2-k)));
0025     E4{k} = kron(kron( eye(2^(k-1)), sqrt(1-p(k))*[0 0; sqrt(g(k)) 0]) ...
0026         , eye(2^(2-k)));
0027
0028     L(k) = (1 + exp(-dt/T2(k)))/2;
0029
0030     E5{k}=kron(kron(eye(2^(k-1)),sqrt(L(k))*[1 0; 0 1] ),eye(2^(2-k)));
0031     E6{k}=kron(kron(eye(2^(k-1)),sqrt(1-L(k))*[1 0;0 -1] ),eye(2^(2-k)));
0032
0033 end
0034
0035 for m=1:np
0036     if typdel == 0; roh = U*roh*U'; end
```

```
    for k=1:2; roh = E1{k}*roh*E1{k}' + E2{k}*roh*E2{k}' + ...
                          E3{k}*roh*E3{k}' + E4{k}*roh*E4{k}'; end
    for k=1:2; roh = E5{k}*roh*E5{k}' + E6{k}*roh*E6{k}'; end
end
typdel = 0;
end
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%     Programa para Simular o FID                                          %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function [fidh fidc] = fidgen(roh1);
global H gh gc Mop1 Mop2 T2 dth dtc th tc
    roh2 = roh1;
    Uh =  expm(-i*H*dth); Uc =  expm(-i*H*dtc);
    for k=1:length(th)
        fidh(k) = gh*trace(Mop1 * roh1)*exp(-th(k)/T2(1));
        roh1 = Uh*roh1*Uh';
    end
    for k=1:length(tc)
        fidc(k) = gc*trace(Mop2 * roh2)*exp(-tc(k)/T2(2));
```

```
        roh2 = Uc*roh2*Uc';

    end
```

C.2 Programas de simulação com as variáveis ocultas

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                          CLOROSIMW :)                                    %
%     Simula experimentos de CQ no clorofórmio utilizando o Modelo        %
%     de variaveis ocultas de Menicucci e Caves PRL 88 (2002) 167901      %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function [struc roh] = clorosimw(pps,gate,ntomo)

cloropar;

global typ w P Q N n

[P Q N n] = GenPQN;

w = roh2w(roheq,Q);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Criaçao do PPS |00> %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

pphw(p1,ph1);   ppcw(p2,ph1);

delayw(1/(4*J12));

pphw(p1,ph2);   ppcw(p2,ph2);

delayw(1/(4*J12));

pphw(p1,ph3);   ppcw(p2,ph3);

```

```
0029 roh = w2roh(w,P,2); roh = diag(diag(roh)); w = roh2w(roh,Q);
0030
0031 pphw(p1/2,ph2);     ppcw(p2/2,ph2);
0032
0033 delayw(1/(2*J12));
0034
0035 pphw(0.3333*p1,ph1); ppcw(0.3333*p2,ph1);
0036
0037 roh = w2roh(w,P,2); roh = diag(diag(roh)); w = roh2w(roh,Q);
0038
0039 if pps == 0;       end;
0040
0041 if pps == 1;    ppcw(2*p2,ph1);  end
0042
0043 if pps == 2;    pphw(2*p1,ph1);  end
0044
0045 if pps == 3;    ppcw(2*p2,ph1);  pphw(2*p1,ph1);  end
0046
0047 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Criaçao de outros PPS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0048
0049 if gate == 1;
0050        ppcw(p2,ph2);     pphw(p1,ph3);
0051        delayw(1/(2*J12));
0052        pphw(p1,ph1);     ppcw(p2,ph4);
0053 end
0054
0055 if gate == 2
0056        ppcw(p2,ph2);  pphw(p1,ph2);
0057 end
0058
0059
0060 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Pulos de Tomografia %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0061
0062 waux = w;
```

```
if nargin == 2; ntomo = 1:9; end

for m = 1:length(ntomo);

k = ntomo(m);

if k==1;  end

if k==2;  ppcw(p2,ph1);  end

if k==3;  ppcw(p2,ph2);  end

if k==4;  pphw(p1,ph1);  end

if k==5;  pphw(p1,ph1);  ppcw(p2,ph1);  end

if k==6;  pphw(p1,ph1);  ppcw(p2,ph2);  end

if k==7;  pphw(p1,ph2);  end

if k==8;  pphw(p1,ph2);  ppcw(p2,ph1);  end

if k==9;  pphw(p1,ph2);  ppcw(p2,ph2);  end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FID %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

[struc.h(m).fid  struc.c(m).fid] = fidgenw(w);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Espectro %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

struc.h(m).esp = fftshift(fft(struc.h(m).fid,nesph));

struc.c(m).esp = fftshift(fft(struc.c(m).fid,nespc));
```

```
0097
0098 struc.h(m).par.sw = swh;
0099
0100 struc.c(m).par.sw = swc;
0101
0102 w = waux;
0103
0104 end
0105
0106 %%%%%%%%%%%%%%%%% Normaliza Matriz Densidade %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0107
0108 roh = w2roh(w,P,2);
0109
0110 f = (1+gh/gc)*sqrt(3/2)*epsi/8;
0111
0112 roh = (roh - eye(4)/4)/f;
0113
```

```
0001 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0002 %     Programa para Simular a Aplicaçao de um pulso de RF no Hidrogenio   %
0003 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0004
0005 function pphw(tp,ph);
0006
0007 global w wr H Ix Iy P Q N
0008
0009 U = expm(-i*(H + wr(1)*(cos(ph)*Ix{1} + sin(ph)*Iy{1}) )*tp);
0010
0011 for k=1:length(N); for m=1:length(N);T(k,m) = N{m}'*U*Q{k}*U'*N{m};end;end
0012
0013 w = w*T;
```

```
0001 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0002 %     Programa para Simular a Aplicaçao de um pulso de RF no Carbono      %
0003 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```

function  ppcw(tp,ph);

global w wr H Ix Iy P Q N

U = expm(-i*(H + wr(2)*( cos(ph)*Ix{2} + sin(ph)*Iy{2} ) )*tp);

for k=1:length(N); for m=1:length(N);T(k,m) = N{m}'*U*Q{k}*U'*N{m};end;end

w = w*T;
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%     Programa para Simular um delay                                       %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function delayw(tp);

global w H P Q N

U =  expm(-i*H*tp);

for k=1:length(N); for m=1:length(N);T(k,m) = N{m}'*U*Q{k}*U'*N{m};end;end

w = w*T;

```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%              Programa para gerar as quantidades P Q N n                  %
%  n é direçao em que o spin pode apontar. Aqui usamos os vércites         %
%  do tetraedro. Outras escolhas sao os vértices do cubo, octaedro,        %
%  icosaedro e dodecaedro                                                  %
%  N compreende todas as 16 configuraçoes (n til)                          %
%  P e Q sao as quantidades em (4) e (7) de Manicucci e Caves              %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

```
0010 function [P Q N n] = GenPQN;
0011
0012 n{1} = [1 1 1];
0013 n{2} = [-1 -1 1];
0014 n{3} = [-1 1 -1];
0015 n{4} = [1 -1 -1];
0016
0017 for k = 1:length(n);
0018
0019         n{k} = n{k}/sqrt(n{k}*n{k}');
0020
0021         ns = n{k}(1)*gatx + n{k}(2)*gaty + n{k}(3)*gatz;
0022
0023         Paux{k} = (eye(2) + ns)/2;
0024
0025         Qaux{k} = (eye(2) + 3*ns)/length(n);
0026
0027         [aux1 aux2] = eig(ns);
0028
0029         if aux2(1,1) == 1;
0030             Naux{k} = aux1(:,1);
0031         else
0032             Naux{k} = aux1(:,2);
0033         end
0034 end
0035
0036
0037 cont =0;
0038
0039     for m = 1:length(n);
0040         for k=1:length(n);
0041             cont = cont +1;
0042             P{cont} = kron(Paux{m},Paux{k});
0043             Q{cont} = kron(Qaux{m},Qaux{k});
```

```
            N{cont} = kron(Naux{m},Naux{k});
        end
    end
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%        Calcula a quasidistribuiçao a partir de roh                      %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function w = roh2w(roh,Q);

for k=1:length(Q)

    w(k) = trace(roh*Q{k});

end
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%        Calcula a roh a partir da quasidistribuiçao                      %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function roh = w2roh(w,P,nq);

roh = zeros(2^nq);

for k=1:length(P)

    roh = roh + w(k)*P{k};

end
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%     Programa para Simular o FID                                         %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function [fidh fidc] = fidgen(w);

```

```
0007 global H gh gc T2 dth dtc th tc P N Q n
0008
0009 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  Evolucao do Hidrogenio %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0010
0011  Uh =  expm(-i*H*dth);
0012
0013  for m1=1:length(w);
0014      for m2=1:length(w);
0015          Th(m1,m2) = N{m2}'*Uh*Q{m1}*Uh'*N{m2};
0016      end;
0017  end;
0018
0019  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  Evolucao do Carbono %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0020
0021  Uc =  expm(-i*H*dtc);
0022
0023  for m1=1:length(w);
0024      for m2=1:length(w);
0025          Tc(m1,m2) = N{m2}'*Uc*Q{m1}*Uc'*N{m2};
0026      end;
0027  end;
0028
0029
0030  %%%%%%%%%%%%%%  Sorteia Lambda e Calcula A(Lambda,n,a) %%%%%%%%%%%%%%%%%%
0031  %a = [1 0 0]  e a = [0 1 0], que corresponde a magnetizacao em x e y      %
0032  %Aqui usamos que A(Lambda,n,a) para n diferentes só diferenrem no sinal   %
0033  %portanto calculamos um só A(Lambda,n,a) e depois trocamos apenas o sinal %
0034  %para cada n.                                                            %
0035  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0036
0037  L = [2*(rand(1,10^7)-0.5)];
0038
0039   for m=1:length(n); nx{m} = [1 0 0]*n{m}'; ny{m} = [0 1 0]*n{m}'; end
0040
```

```
0041   L = sort(L);
0042
0043   A(L<-nx{1})=-1;A(L>=-nx{1})=1; Aux = trapz(L,A)/2;
0044
0045   k=1;
0046   for m1=1:length(n);
0047       for m2=1:length(n);
0048           Ah{k} = i*sign(nx{m1})*Aux  - sign(ny{m1})*Aux;
0049           Ac{k} = i*sign(nx{m2})*Aux  - sign(ny{m2})*Aux;
0050           k=k+1;
0051       end;
0052   end
0053
0054  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FID DO HIDROGENIO %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0055      wh =w;
0056
0057      for k=1:length(th)
0058
0059              fidh(k) = 0;
0060
0061              for m=1:length(w);
0062                  fidh(k) = fidh(k) + gh*wh(m)*Ah{m}*exp(-th(k)/T2(1));
0063              end;
0064
0065              wh = wh*Th;
0066
0067      end
0068
0069  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FID DO CARBONO  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
0070
0071     wc =w;
0072
0073     for k=1:length(tc)
0074
```

```
            fidc(k) = 0;

            for m=1:length(w);
                fidc(k) = fidc(k) + gc*wc(m)*Ac{m}*exp(-tc(k)/T2(1));
            end

            wc = wc*Tc;

    end
```

C.3 Programas de tomografia

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%   Programa de Tomografia                                                %
%   nh - é o fator de normalizacao do hidrogenio                          %
%   nc - é o fator de normalizacao do carbono                             %
%   amph =[A1 A2 A3 A4 .....] A1 (A2) é a amplitude da parte real         %
%   (imaginaria) do pico referente a transicao 00 <-> 10, A3 (B4) se      %
%   refere a transicao  01 <-> 11. De A5 em diante é a mesma coisa par os %
%   demais pulsos de leitura                                              %
%   ampc =[B1 B2 B3 B4 .....] B1 (B2) é a amplitude da parte real         %
%   (imaginaria) do pico referente a transicao 00 <-> 01, B3 (B4) se      %
%   refere a transicao  10 <-> 11. De A5 em diante é a mesma coisa par os %
%   demais pulsos de leitura                                              %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function [roh amp] = tomograf(amph,ampc,nh,nc);

amp = [amph ampc 0];

AA = calc_coef2(1:18);

CC = AA'*AA;

```

```
b2 = amp*AA;

[avec,aval]=eig(CC);

UU = inv(avec);

b2 = UU*b2';

yy = aval\b2;

xx = UU\yy;

roh = [xx(1)            xx(2)+i*xx(11)  xx(3)+i*xx(12)  xx(4)+i*xx(13);
       xx(2)-i*xx(11)   xx(5)           xx(6)+i*xx(14)  xx(7)+i*xx(15);
       xx(3)-i*xx(12)   xx(6)-i*xx(14)  xx(8)           xx(9)+i*xx(16);
       xx(4)-i*xx(13)   xx(7)-i*xx(15)  xx(9)-i*xx(16)  xx(10)  ];
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Função para calcular a matriz se coeficientes para o sistema de equações %
%da tomografia                                                            %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function  A = calc_coef2(seq)

nmed = length(seq);

RX = (1/sqrt(2))*[1 -i;-i 1];

RY = (1/sqrt(2))*[1 -1;1 1];

II(:,:,1) = eye(4);                 II(:,:,2) = kron(eye(2),RX);
II(:,:,3) = kron(eye(2),RY);        II(:,:,4) = kron(RX,eye(2));
II(:,:,5) = kron(RX,RX);            II(:,:,6) = kron(RX,RY);
II(:,:,7) = kron(RY,eye(2));        II(:,:,8) = kron(RY,RX);
II(:,:,9) = kron(RY,RY);            II(:,:,10) = II(:,:,1);
```

```
0019 II(:,:,11) = II(:,:,2);              II(:,:,12) = II(:,:,3);
0020 II(:,:,13) = II(:,:,4);              II(:,:,14) = II(:,:,5);
0021 II(:,:,15) = II(:,:,6);              II(:,:,16) = II(:,:,7);
0022 II(:,:,17) = II(:,:,8);              II(:,:,18) = II(:,:,9);
0023
0024 mo=1;
0025
0026 dd =[1 5 8 10];
0027
0028 for n=1:nmed;
0029
0030        mt= II(:,:,seq(n));
0031
0032        if seq(n)< 10; elemen =[1 3;2 4]; else; elemen =[1 2;3 4]; end
0033
0034        bb=1;
0035
0036        for m=mo:2:mo+2
0037
0038            ii=elemen(bb,1);        jj=elemen(bb,2);
0039            bb=bb+1;                h1=2;             h2=2;
0040
0041            for k=1:4
0042                for l=k+1:4
0043                    aux1= mt(ii,k)*conj(mt(jj,l)) + mt(ii,l)*conj(mt(jj,k));
0044                    aux2= mt(ii,l)*conj(mt(jj,k)) - mt(ii,k)*conj(mt(jj,l));
0045                    A(m,h1) =real(aux1);      A(m,h2+9)=imag(aux2);
0046                    A(m+1,h1)=imag(aux1);     A(m+1,h2+9)=real(-aux2);
0047                    h2 = h2+1;                h1 =h1+1;
0048                end
0049                h1=h1+1;
0050            end
0051
0052            for k=1:4
```

```
0053                aux3= mt(ii,k)*conj(mt(jj,k));
0054                A(m,dd(k))=real(aux3);
0055                A(m+1,dd(k))=imag(aux3);
0056            end
0057
0058        end
0059
0060        mo=mo+4;
0061
0062 end
0063
0064 A(nmed*4+1,:) = [1 0 0 0 1 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0];
0065
0066
```

C.4 Programas para o estudo do emaranhamento térmico

```
0001
0002 %=========================================================================%
0003 %                PROGRAMA PARA ESTUDAR O EMARANHAMENTO                    %
0004 %                     NO SISTEMA DÍMERO - TRÍMERO                         %
0005 % ========================================================================%
0006
0007 clear all;
0008 clc;
0009 close all;
0010
0011 %=======================  Define Matrizes  ============================%
0012
0013         sig{1} = gatx/2;      sig{2} = gaty/2;     sig{3} = gatz/2;
0014
0015       for n = 1:5;   for m = 1:3; S{n,m} = mgat(5,n,sig{m});   end;   end
0016
0017 for m=1:3; S{6,m} = S{4,m} + S{5,m}; S{7,m} = S{1,m} + S{2,m} + S{3,m}; end
```

```
0018
0019   Sprod = @(s1,s2) S{s1,1}*S{s2,1} + S{s1,2}*S{s2,2} + S{s1,3}*S{s2,3};
0020
0021  Stz = S{6,3} +  S{7,3};  Sty = S{6,2} +  S{7,2};  Stx = S{6,1} +  S{7,1};
0022
0023 %====================   Parâmetros da Amostra  ========================%
0024
0025 Kb  = 1.380e-16;    mb  = 9.274e-21;   g = 2.3;  A = g^2*mb^2/Kb;
0026
0027 J1  = -224.9*Kb;  J2  = -8.01*Kb; J3  = 40.22*Kb;
0028
0029 Hd = - J3*Sprod(4,5);
0030
0031 Ht = -J1*(Sprod(1,2) + Sprod(2,3));
0032
0033 Hdt =  - J2*Sprod(7,6);
0034
0035 Hint = Hd + Ht + Hdt;
0036
0037 %============================ Calculo teórico ============================%
0038
0039  T = 8:1:220;            B = 0:100e3:3000e3;
0040
0041   for m=1:length(T);
0042
0043       for k=1:length(B)
0044
0045       %============= Hamiltoniana e Matriz Densidade ======================
0046
0047       H = Hint - g*mb*B(k)*Stz;
0048
0049       roh = expm(-H/(Kb*T(m)));
0050       z = trace(roh);
0051       roh = roh/z;
```

```
0052        rA = ztrace(ztrace(roh,5),4);
0053        rB = ztrace(ztrace(ztrace(roh,1),1),1);
0054
0055        r12 = ztrace(rA,3);
0056        r23 = ztrace(rA,1);
0057        r13 = ztrace(rA,2);
0058
0059        %========================== Magnetizaçao  ==========================
0060
0061        Sz(m,k) = trace(Stz*roh);   S2z(m,k) = trace(Stz^2*roh);
0062        Sy(m,k) = trace(Sty*roh);   S2y(m,k) = trace(Sty^2*roh);
0063        Sx(m,k) = trace(Stx*roh);   S2x(m,k) = trace(Stx^2*roh);
0064
0065        SAz(m,k) = trace(S{7,3}*rA);   SA2z(m,k) = trace(S{7,3}^2*rA);
0066        SAy(m,k) = trace(S{7,2}*rA);   SA2y(m,k) = trace(S{7,2}^2*rA);
0067        SAx(m,k) = trace(S{7,1}*rA);   SA2x(m,k) = trace(S{7,1}^2*rA);
0068
0069        SAz(m,k) = trace(S{6,3}*rB);   SA2z(m,k) = trace(S{6,3}^2*rB);
0070        SAy(m,k) = trace(S{6,2}*rB);   SA2y(m,k) = trace(S{6,2}^2*rB);
0071        SAx(m,k) = trace(S{6,1}*rB);   SA2x(m,k) = trace(S{6,1}^2*rB);
0072
0073        %========================== C e EF ================================
0074
0075        C12 = concurr(r12);       Ef12(m,k) = Eform(C12);
0076        C13 = concurr(r13);       Ef13(m,k) = Eform(C13);
0077        C23 = concurr(r23);       Ef23(m,k) = Eform(C23);
0078        C45 = concurr(rB);        Ef45(m,k) = Eform(C45);
0079
0080        %========================== Susceptibilidade ======================
0081        X(m,k) = A*(S2z(m,k) - Sz(m,k)^2)./T(m);
0082
0083        XA(m,k) = A*(S2z(m,k) - Sz(m,k)^2)./T(m);
0084
0085        XB(m,k) = A*(S2z(m,k) - Sz(m,k)^2)./T(m);
```

```
        end
    end

```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Funçao para Calcular Concurrencia                                       %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function C = concurr(roh);

roh = roh * (kron(gaty,gaty)*conj(roh)*kron(gaty,gaty));

L =  sort(real(eig(roh)),'descend');

C = max( [0  real(sqrt(L(1))-sqrt(L(2))-sqrt(L(3))-sqrt(L(4)))]);

```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Funçao para Calcular o Emaranhamento da Formacao                        %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function Ef = Eform(C);

x = (1 + sqrt(1 - C^2) )/2;

if x == 0 | x ==1;
    Ef = 0;
else;
    Ef = -x*log2(x) - (1-x)*log2(1-x);
end;
```

Referências

[1] A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete. *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).

[2] M. Genovese. Research on hidden variable theories: A review of recent progresses. *Phys. Rep.* **413**, 319 (2005).

[3] J. S. Bell. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. *Physics* **1**, 195 (1964).

[4] J. S. Bell. *Speakble and Unspeakble in Quantum Mechanics* (Camdridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1987).

[5] M. A. Nielsen. *Quantum information theory.* Tese de Doutorado, University of New Mexico (1998). ArXiv:quant-ph/0011036.

[6] M. C. Arnesen, S. Bose e V. Vedral. Natural thermal and magnetic entanglement in the 1D Heisenberg model. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017901 (2001).

[7] S. Ghosh, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli e S. N. Coppersmith. Entangled quantum state of magnetic dipoles. *Nature* **452**, 48 (2003).

[8] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony e R. A. Holt. Proposed experiment to test local hidden-variable theories. *Phys. Rev. Lett.* **23**, 880 (1969).

[9] A. Aspect. Bell's theorem: The naive view of an experimentalist. ArXiv:quant-ph/0402001 (não publicado).

[10] N. C. Menicucci e C. M. Caves. Local realistic model for the dynamics of bulk-ensemble NMR information processing. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167901 (2002).

[11] G. O. Myhr. *Measures of entanglement in quantum mechanics.* Tese de Mestrado, Norwegian University of Science and Technology (2004). ArXiv:quant-ph/0408094.

[12] D. Bruß. Characterizing entanglement. *J. Math. Phys.* **43**, 4237 (2002).

[13] M. Horodecki. Entanglement measures. *Quant. Inf. Comp.* **1**, 3 (2001).

[14] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki e K. Horodecki. Quantum entanglement. ArXiv:quant-ph/0702225 (não publicado).

[15] M. B. Plenio e S. Virmani. An indroduction to entanglement measures. *Quant. Inf. Comp.* **7**, 1 (2007).

[16] F. Mintert, A. R. R. Carvalho, M. Kuś e A. Buchleitner. Measures and dynamics of entangled states. *Phys. Rep.* **415**, 207 (2005).

[17] W. K. Wootters. Entanglement of formation and concurrence. *Quant. Inf. Comp.* **1**, 27 (2001).

[18] R. F. Werner e M. M. Wolf. Bell inequalities and entanglement. *Quant. Inf. Comp.* **1**, 1 (2001).

[19] T. Paterek, W. Laskowski e M. Żukowski. On series of multiqubit Bell's inequalities. *Mod. Phys. Lett. A* **21**, 111 (2006).

[20] M. Horodecki, P. Horodecki e R. Horodecki. Separability of mixed states: Necessary and sufficient conditions. *Phys. Lett. A* **223**, 1 (1996).

[21] C. S. Yu e H. S. Song. Separability criterion of tripartite qubit systems. *Phys. Rev. A* **72**, 022333 (2005).

[22] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu e B. Shumacher. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).

[23] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin e W. K. Wootters. Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Phys. Rev. A* **54**, 3824 (1996).

[24] W. K. Wootters. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).

[25] K. G. H. Vollbrecht e R. F. Werner. Entanglement measures under symmetry. *Phys. Rev. A* **64**, 062307 (2001).

[26] B. M. Terhal e K. G. H. Vollbrecht. Entanglement of formation for isotropic states. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2625 (2000).

[27] R. F. Werner. Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Phys. Rev. A* **40**, 4277 (1989).

[28] K. Życzkowski. Volume of the set of separable states. *Phys. Rev. A* **60**, 3496 (1999).

[29] K. Audenaert, F. Verstraete e B. DeMoor. Variational characterizations of separability and entanglement of formation. *Phys. Rev. A* **64**, 052304 (2001).

[30] F. Verstraete, J. Dehaene e B. DeMoor. Local filtering operations on two qubits. *Phys. Rev. A* **64**, 010101(R) (2001).

[31] R. R. Tucci. Relaxation method for calculating quantum entanglement. ArXiv:quant-ph/0101123 (não publicado).

[32] J. R. Gittings e A. J. Fisher. An efficient numerical method for calculating the entanglement of formation of arbitrary mixed quantum states of any dimension. ArXiv:quant-ph/0302018 (não publicado).

[33] G. Vidal e R. F. Werner. Computable measure of entanglement. *Phys. Rev. A* **65**, 032314 (2002).

[34] V. Vedral e M. B. Plenio. Entanglement measures and purification procedures. *Phys. Rev. A* **57**, 1619 (1998).

[35] M. A. Nielsen e I. L. Chuang. *Computação Quântica e Informação Quântica* (Bookman, Porto Alegre, Brasil, 2005).

[36] K. Audenaert, B. DeMoor, K. G. H. Vollbrecht e R. F. Werner. Asymptotic relative entropy of entanglement for orthogonally invariant states. *Phys. Rev. A* **66**, 032310 (2002).

[37] P. M. Hayden, M. Horodecki e B. M. Terhal. The asymptotic entanglement cost of preparing a quantum state. *J. Phys. A: Math. Gen.* **34**, 6891 (2001).

[38] W. Dür, G. Vidal e J. I. Cirac. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways. *Phys. Rev. A* **62**, 062314 (2000).

[39] B. M. Terhal. Bell inequalities and the separability criterion. *Phys. Lett. A* **271**, 319 (2000).

[40] N. Gisin e A. Peres. Maximal violation of Bell's inequality for arbitrarily large spin. *Phys. Lett. A* **162**, 15 (1992).

[41] S. Popescu e D. Rohrlich. Generic quantum nonlocality. *Phys. Lett. A* **166**, 293 (1992).

[42] B. S. Cirel'son. Quantum generalizations of Bell's inequality. *Lett. Math. Phys.* **4**, 93 (1980).

[43] N. Gisin. Bell's inequality holds for all non-product states. *Phys. Lett. A* **154**, 201 (1991).

[44] R. Horodecki, P. Horodecki e M. Horodecki. Violating Bell inequality by mixed spin-1/2 states: Necessary and sufficient condition. *Phys. Lett. A* **200**, 340 (1995).

[45] P. K. Aravind. To what extent do mixed states violate the Bell inequalities? *Phys. Lett. A* **200**, 345 (1995).

[46] A. Fine. Hidden variables, joint probability, and the Bell inequalities. *Phys. Rev. Lett.* **48**, 291 (1982).

[47] M. Lamehi-Rachti e W. Mittig. Quantum mechanics and hidden variables: A test of Bell's inequality by the measurement of the spin correlation in low-energy proton-proton scattering. *Phys. Rev. D* **14**, 2543 (1976).

[48] M. A. Rowe, D. Kielpinski, V. Meyer, C. A. Sackett, W. M. Itano, C. Monroe e D. J. Wineland. Experimental violation of Bell's inequality with efficient detection. *Nature* **409**, 791 (2001).

[49] D. N. Matsukevich, P. Maunz, D. L. Moehring, S. Olmschenk e C. Monroe. Bell inequality violation with two remote atomic qubits. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 150404 (2008).

[50] H. Sakai, T. Saito, T. Ikeda, K. Itoh, T. Kawabata, H. Kuboki, Y. Maeda, N. Matsui, C. Rangacharyulu, M. Sasano, Y. Satou, K. Sekiguchi, K. Suda, A. Tamii, T. Uesaka e K. Yako. Spin correlations of strongly interacting massive fermion pairs as a test of Bell's inequality. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 150405 (2006).

[51] D. L. Moehring, M. J. Madsen, B. B. Blinov e C. Monroe. Experimental Bell inequality violation with an atom and a photon. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090410 (2004).

[52] Y. Hasegawa, R. Loidl, G. Badurek, M. Baron e H. Rauch. Violation of a Bell-like inequality in single-neutron interferometry. *Nature* **425**, 45 (2003).

[53] R. Ursin, F. Tiefenbacher, T. Schmitt-Manderbach, H. Weier, T. Scheidl, M. Lindenthal, B. Blauensteiner, T. Jennewein, J. Perdigues, P. Trojek, B. Ömer, M. Fürst, M. Meyenburg, J. Rarity, Z. Sodnik, C. Barbieri, H. Weinfurter e A. Zeilinger. Free-space distribution of entanglement and single photons over 144 km. *Nature Physics* **3**, 481 (2007).

[54] N. D. Mermin. Extreme quantum entanglement in a superposition of macroscopically distinct states. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1838 (1990).

[55] M. Ardehali. Bell inequalities with a magnitude of violation that grows exponentially with the number of particles. *Phys. Rev. A* **46**, 5375 (1992).

[56] A. V. Belinskii e D. N. Klyshko. Interference of light and Bell's theorem. *Phys. Usp.* **36**, 653 (1993).

[57] Y. A. Chen, T. Yang, A. N. Zhang, Z. Zhao, A. Cabello e J. W. Pan. Experimental violation of Bell's inequality beyond Tsirelson's bound. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170408 (2006).

[58] Z. Zhao, T. Yang, Y. A. Chen, A. N. Zhang, M. Żukowski e J. W. Pan. Experimental violation of local realism by four-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 180401 (2003).

[59] P. M. Pearle. Hidden-variable example based upon data rejection. *Phys. Rev. D* **2**, 1418 (1970).

[60] A. Garg e N. D. Mermin. Detector inefficiencies in the Einstein-Podolsky-Rosen experiment. *Phys. Rev. D* **35**, 3831 (1987).

[61] A. Aspect, J. Dalibard e G. Roger. Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analyzers. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804 (1982).

[62] G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter e A. Zeilinger. Violation of Bell's inequality under strict Einstein locality conditions. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039 (1998).

[63] S. Gröblacher, T. Paterek, R. Kaltenbaek, Č. Brukner, M. Żukowski, M. Aspelmeyer e A. Zeilinger. An experimental test of non-local realism. *Nature* **446**, 871 (2007).

[64] I. Pitowsky. Correlation polytopes: Their geometry and complexity. *Math. Programming.* **50**, 395 (1991).

[65] R. F. Werner e M. M. Wolf. All-multipartite Bell-correlation inequalities for two dichotomic observables per site. *Phys. Rev. A* **64**, 032112 (2001).

[66] M. Żukowski e Č. Brukner. Bell's theorem for general N-qubit states. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 210401 (2002).

[67] K. Nagata, W. Laskowski e T. Paterek. Bell inequality with arbitrary number of settings and its applications. *Phys. Rev. A* **74**, 062109 (2006).

[68] W. Laskowsky, T. Paterek, M. Żukowski e Č. Brukner. Tight multipartite Bell's inequalities involving many measurement settings. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 200401 (2004).

[69] M. Żukowski, Č. Brukner, W. Laskowski e M. Wieśniak. Do all pure entangled states violate Bell's inequalities for correlation functions? *Phys. Rev. Lett.* **88**, 210402 (2002).

[70] A. J. Leggett e A. Garg. Quantum mechanics versus macroscopic realism: Is the flux there when nobody looks? *Phys. Rev. Lett.* **54**, 857 (1985).

[71] J. P. Paz e G. Mahler. Proposed test for temporal Bell inequalities. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3235 (1993).

[72] R. Ruskov, A. N. Korotkov e A. Mizel. Signatures of quantum behavior in single-qubit weak measurements. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 200404 (2006).

[73] A. N. Jordan, A. N. Korotkov e M. Büttiker. Leggett-Garg inequality with a kicked quantum pump. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 026805 (2006).

[74] I. S. Oliveira, T. J. Bonagamba, R. S. Sarthour, J. C. C. Freitas e E. R. deAzevedo. *NMR Quantum Information Processing* (Elsevier, Amsterdam, Holanda, 2007).

[75] A. Galindo e M. A. Martín-Delgado. Information and computation: Classical and quantum aspects. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 347 (2002).

[76] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel e H. Zbinden. Quantum criptography. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145 (2002).

[77] P. Horowitz e W. Hill. *The Art of Eletronics* (Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1989).

[78] R. Raussendorf e H. J. Briegel. A one-way quantum computer. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5188 (2001).

[79] H. J. Briegel e R. Raussendorf. Persistent entanglement in arrays of interacting particles. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 910 (2001).

[80] P. Walther, K. J. Resch, T. Rudolph, E. Schenck, H. Weinfurter, V. Vedral, M. Aspelmeyer e A. Zeilinger. Experimental one-way quantum computing. *Nature* **434**, 169 (2005).

[81] R. Prevedel, P. Walther, F. Tiefenbacher, P. Böhi, R. Kaltenbaek, T. Jennewein e A. Zeilinger. High-speed linear optics quantum computing using active feed-forward. *Nature* **445**, 65 (2007).

[82] M. S. Tame, R. Prevedel, M. Paternostro, P. Böhi, M. S. Kim e A. Zeilinger. Experimental realization of deutsch's algorithm in a one-way quantum computer. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 140501 (2007).

[83] K. Chen, C. M. Li, Q. Zhang, Y. A. Chen, A. Goebel, S. Chen, A. Mair e J. W. Pan. Experimental realization of one-way quantum computing with two-photon four-qubit cluster states. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 120503 (2007).

[84] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren e D. Preda. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem. *Science* **292**, 472 (2001).

[85] A. Messiah. *Quantum Mechanics* (North Holland Publ. Co., Amsterdam, Holanda, 1976).

[86] M. Steffen, W. van Dam, T. Hogg, G. Breyta e I. Chuang. Experimental implementation of an adiabatic quantum optimization algorithm. *Phys, Rev. Lett.* **90**, 067903 (2003).

[87] A. Mitra, A. Ghosh, R. Das, A. Patel e A. Kumar. Experimental implementation of local adiabatic evolution algorithms by an NMR quantum information processor. *J. Mag. Res.* **177**, 285 (2005).

[88] D. Aharonov, W. van Dam, J. Kempe, Z. Landau, S. Lloyd e O. Regev. Adiabatic quantum computation is equivalent to standard quantum computation. *SIAM Journal of Computing* **37**, 166 (2007).

[89] P. W. Shor. Progress in quantum Algorithms. *Quant. Inf. Proc.* **3**, 5 (2004).

[90] Y. S. Weinstein, M. A. Pravia, E. M. Fortunato, S. Lloyd e D. G. Cory. Implementation of the quantum Fourier transform. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1889 (2001).

[91] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood e I. L. Chuang. Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. *Nature* **414**, 883 (2001).

[92] L. K. Grover. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).

[93] I. L. Chuang, N. Gershenfeld e M. Kubinec. Experimental implementation of fast quantum searching. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3408 (1998).

[94] J. J. M. Mosca e R. H. Hansen. Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer. *Nature* **393**, 344 (1998).

[95] M. S. Anwar, D. Blazina, H. A. Carteret, S. B. Duckett e J. A. Jones. Implementing Grover's quantum search on a para hydrogen based pure state NMR quantum computer. *Chem. Phys. Lett.* **400**, 94 (2004).

[96] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, M. H. Sherwood, C. S. Yannoni, G. Breyta e I. L. Chuang. Implementation of three quantum bit search algorithm. *Appl. Phys. Lett.* **76**, 646 (2000).

[97] K. A. Brickman, P. C. Haljan, P. J. Lee, M. Acton, L. Deslauriers e C. Monroe. Implementation of Grover's quantum search algorithm in a scalable system. *Phys. Rev. A* **72**, 050306(R) (2005).

[98] R. P. Feynman. Simulating physics with computers. *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).

[99] S. Lloyd. Universal quantum simulators. *Science* **273**, 1073 (1996).

[100] C. Zalka. Simulating quantum systems on a quantum computer. *Proc. R. Soc. Lond. A* **454**, 313 (1998).

[101] R. Schack. Simulation on a quantum computer. *Informatik Forsch. Entw.* **21**, 21 (2006).

[102] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs e G. Rajagopal. Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Rev. Mod. Phys.* **73**, 33 (2001).

[103] G. Ortiz, J. E. Gubernatis, E. Knill e R. Laflamme. Quantum algorithms for fermionic simulations. *Phys. Rev. A* **64**, 022319 (2001).

[104] R. S. G. Ortiz, J. E. Gubernatis, E. Knill e R. Laflamme. Simulating physical phenomena by quantum networks. *Phys. Rev. A* **65**, 042323 (2002).

[105] A. T. Sornborger e E. D. Stewart. Higher-order methods for simulations on quantum computers. *Phys. Rev. A* **60**, 1956 (1999).

[106] S. Somaroo, C. H. Tseng, T. F. Havel, R. Laflamme e D. G. Cory. Quantum simulations on a quantum computer. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5381 (1999).

[107] C. H. Tseng, S. Somaroo, Y. Sharf, E. Knill, R. Laflamme, T. F. Havel e D. G. Cory. Quantum simulation of a three-body-interaction hamiltonian on a NMR quantum computer. *Phys. Rev. A* **61**, 012302 (1999).

[108] A. K. Khitrin e B. M. Fung. NMR simulation of a eight-state quantum system. *Phys. Rev. A* **64**, 032306 (2001).

[109] C. Negrevergne, R. S. G. Ortiz, E. Knill e R. Laflamme. Liquid-state NMR simulation of quantum many-body problems. *Phys. Rev. A* **71**, 032344 (2005).

[110] X. Yang, A. M. Wang, F. Xu e J. Du. Experimental simulation of a pairing hamiltonian on an NMR quantum computer. *Chem. Phys. Lett.* **422**, 20 (2006).

[111] X. Peng, J. Du e D. Suter. Quantum phase transition of ground-state entanglement in a Heisenberg spin chain simulated in an NMR quantum computer. *Phys. Rev. A* **71**, 012307 (2005).

[112] A. Ekert e R. Jozsa. Quantum algorithms: Entanglement-enhanced information processing. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **356**, 1769 (1998).

[113] N. Linden e S. Popescu. Good dynamics versus bad kinematics: Is entanglement needed for quantum computation? *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047901 (2001).

[114] D. A. Meyer. Sophisticated quantum search without entanglement. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2014 (2000).

[115] G. J. Milburn, R. Laflamme, B. C. Sanders e E. .Knill. Quantum dynamics of two coupled qubits. *Phys. Rev. A* **65**, 032316 (2002).

[116] C. H. Bennett e S. J. Wiesner. Communication via one and two particle operators on Einstein-Podolsky-Rosen states. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2881 (1992).

[117] K. Mattle, H. Weinfurter, P. G. Kwiat e A. Zeilinger. Dense coding in experimental quantum communication. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4656 (1996).

[118] X. Fang, X. Zhu, M. Feng, X. Mao e F. Du. Experimental implementation of dense coding using nuclear magnetic resonance. *Phys. Rev. A* **61**, 022307 (2000).

[119] T. Schaetz, M. D. Barrett, D. Leibfried, J. Chiaverini, J. Britton, W. M. Itano, J. D. Jost, C. Langer e D. J. Wineland. Quantum dense coding with atomic qubits. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 040505 (2004).

[120] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres e W. K. Wootters. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).

[121] G. Brassard, S. L. Braunstein e R. Cleve. Teleportation as a quantum computation. *Physica D* **120**, 43 (1998).

[122] D. Gottesman e I. L. Chuang. Demonstrating the viability of universal quantum computation using teleportation and single-qubit operations. *Nature* **402**, 390 (1999).

[123] D. Bouwmeester, J. W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter e A. Zeilinger. Experimental quantum teleportation. *Nature* **390**, 575 (1997).

[124] D. Boschi, S. Branca, F. DeMartini, L. Hardy e S. Popescu. Experimental realization of teleporting an unknown pure quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1121 (1998).

[125] M. A. Nielsen, E. Knill e R. Laflamme. Complete quantum teleportation using nuclear magnetic resonance. *Nature* **396**, 52 (1998).

[126] M. D. Barrett, J. Chiaverini, T. Schaetz, J. Britton, W. M. Itano, J. D. Jost, E. Knill, C. Langer, D. Leibfried, R. Ozeri e D. J. Wineland. Deterministic quantum teleportation of atomic qubits. *Nature* **429**, 737 (2004).

[127] M. Riebe, H. Häffner, C. F. Roos, W. Hänsel, J. Benhelm, G. P. T. Lancaster, T. W. Körber, C. Becher, F. Schmidt-Kaler, D. F. V. James e R. Blatt. Deterministic quantum teleportation with atoms. *Nature* **429**, 734 (2004).

[128] J. F. Sherson, H. Krauter, R. K. Olsson, B. Julsgaard, K. Hammerer, I. Cirac e E. S. Polzik. Quantum teleportation between light and matter. *Nature* **443**, 557 (2006).

[129] M. Żukowski, A. Zeilinger, M. A. Horne e A. K. Ekert. Event-ready-detectors Bell experiment via entanglement swapping. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4287 (1993).

[130] T. Jennewein, G. Weihs, J. W. Pan e A. Zeilinger. Experimental nonlocality proof of quantum teleportation and entanglement swapping. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017903 (2002).

[131] Č. Brukner, M. Żukowski, J. W. Pan e A. Zeilinger. Bell's inequalities and quantum communication complexity. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 127901 (2004).

[132] R. Cleve e H. Buhrman. Substituting quantum entanglement for communication. *Phys. Rev. A* **56**, 1201 (1997).

[133] H. Buhrman, W. van Dam, P. Hoyer e A. Tapp. Multiparty quantum communication complexity. *Phys. Rev. A* **60**, 2737 (1999).

[134] E. F. Galvão. Feasible quantum communication complexity protocol. *Phys. Rev. A* **65**, 012318 (2001).

[135] D. Mayers e A. Yao. Quantum cryptography with imperfect apparatus. Em *Proceedings of the 39th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (1998). ArXiv:quant-ph/9809039.

[136] A. Acín, N. Gisin e L. Masanes. From Bell's theorem to secure quantum key distribution. *Phys, Rev. Lett.* **97**, 120405 (2006).

[137] A. K. Ekert. Quantum criptography based on Bell's theorem. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 661 (1991).

[138] V. Scarani e N. Gisin. Quantum communication between N partners and Bell's inequalities. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 117901 (2001).

[139] C. H. Bennett, F. Bessette, G. Brassard, L. Salvail e J. Smolin. Experimental quantum cryptography. *J. Criptology* **5**, 3 (1992).

[140] T. Jennewein, C. Simon, G. Weihs, H. Weinfurter e A. Zeilinger. Quantum cryptography with entangled photons. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4729 (2000).

[141] D. S. Naik, C. G. Peterson, A. G. White, A. J. Berglund e P. G. Kwiat. Entangled state quantum cryptography: Eavesdropping on the Ekert protocol. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4733 (2000).

[142] W. Tittel, J. Brendel, H. Zbinden e N. Gisin. Quantum cryptography using entangled photons in energy-time Bell states. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4737 (2000).

[143] T. Schmitt-Manderbach, H. Weier, M. Fürst, R. Ursin, F. Tiefenbacher, T. Scheidl, J. Perdigues, Z. Sodnik, C. Kurtsiefer, J. G. Rarity, A. Zeilinger e H. Weinfurter. Experimental demonstration of free-space decoy-state quantum key distribution over 144 km. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 010504 (2007).

[144] V. Giovannetti, S. Lloyd e L. Maccone. Quantum-enhanced measurements: Beating the standard quantum limit. *Science* **306**, 1330 (2004).

[145] V. Giovannetti, S. Lloyd e L. Maccone. Quantum metrology. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 010401 (2006).

[146] T. Nagata, R. Okamoto, J. L. O'Brien, K. Sasaki e S. Takeuchi. Beating the standard quantum limit with four-entangled photons. *Science* **316**, 726 (2007).

[147] A. M. Souza, A. Magalhães, J. Teles, E. R. deAzevedo, T. J. Bonagamba, I. S. Oliveira e R. S. Sarthour. NMR analog of Bell's inequalities violation test. *New J. Phys.* **10**, 033020 (2008).

[148] L. M. K. Vandersypen. *Experimental quantum computation with nuclear spins in liquid solution.* Tese de Doutorado, Stanford University (2001). ArXiv:quant-ph/0205193.

[149] M. Steffen. *A prototype quantum computer using nuclear spins in liquid solution.* Tese de Doutorado, Stanford University (2003).

[150] L. M. K. Vandersypen e I. L. Chuang. NMR techniques for quantum control and computation. *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1037 (2004).

[151] D. G. Cory, R. Laflamme, E. Knill, L. Viola, T. F. Havel, N. Boulant, G. Boutis, E. Fortunato, S. Lloyd, R. Martinez, C. Negrevergne, M. Pravia, Y. Sharf, G. Teklemariam, Y. S. Weinstein e W. H. Zurek. NMR based quantum information processing: Achievements and prospects. *Fortschr. Phys.* **48**, 875 (2000).

[152] J. A. Jones. NMR quantum computation. *Prog. NMR. Spectrosc.* **38**, 325 (2001).

[153] R. Freeman. *Spin Choreograph* (Oxford University Press, Oxford, Reino Unido, 1997).

[154] C. Slichter. *Principles of Magnetic Resonance* (Springer Verlag, Berlin, Alemanha, 1990).

[155] A. K. Khitrin e B. M. Fung. Nuclear magnetic resonance quantum logic gates using quadrupolar nuclei. *J. Chem. Phys.* **112**, 6963 (2000).

[156] K. V. R. M. Murali, N. Sinha, T. S. Mahesh, M. H. Levitt, K. V. Ramanathan e A. Kumar. Quantum-information processing by nuclear magnetic resonance: Experimental implementation of half-adder and subtractor operations using an oriented spin-7/2 system. *Phys. Rev. A* **66**, 022313 (2002).

[157] F. A. Bonk, E. R. deAzevedo, R. S. Sarthour, J. D. Bulnes, J. C. C. Freitas, A. P. Guimarães, I. S. Oliveira e T. J. Bonagamba. Quantum logical operations for spin 3/2 quadrupolar nuclei monitored by quantum state tomography. *J. Magn. Reson.* **175**, 226 (2005).

[158] C. C. Tannoudji, B. Diu e F. Laloë. *Quantum Mechanics* (Jhon Wiley & Sons, Paris, França, 1977).

[159] N. A. Gershenfeld e I. L. Chuang. Bulk spin-resonance quantum computation. *Science* **275**, 350 (1997).

[160] D. G. Cory, A. F. Fahmy e T. F. Havel. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **94**, 1634 (1997).

[161] I. L. Chuang, N. Gershenfeld, M. G. Kubinec e D. W. Leung. Bulk quantum computation with nuclear magnetic resonance: Theory and experiment. *Proc. R. Soc. Lond. A* **454**, 447 (1998).

[162] M. Pravia, E. Fortunato, Y. Weinstein, M. D. Price, G. Teklemariam, R. J. Nelson, Y. Sharf, S. Somaroo, C. H. Tseng, T. F. Havel e D. G. Cory. Observations of quantum dynamics by solution-state NMR spectroscopy. *Concepts. Magn. Res.* **11**, 225 (1999).

[163] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu e R. Schack. Separability of very noisy mixed state and implications for NMR quantum computing. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1054 (1999).

[164] G. L. Long, H. Y. Yan e Y. Sun. Analysis of density matrix reconstruction in NMR quantum computing. *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **3**, 376 (2001).

[165] J. S. Lee. The quantum state tomography on an NMR system. *Phys. Lett. A* **305**, 349 (2002).

[166] F. A. Bonk, R. S. Sarthour, E. R. deAzevedo, J. D. Bulnes, G. L. Mantovani, J. C. C. Freitas, T. J. Bonagamba, A. P. Guimarães e I. S. Oliveira. Quantum-state tomography for quadrupolar nuclei and its application on a two-qubit system. *Phys. Rev. A* **69**, 042322 (2004).

[167] J. Teles, E. R. deAzevedo, R. Auccaise, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira e T. J. Bonagamba. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system. *J. Chem. Phys.* **126**, 154506 (2007).

[168] E. Fukushima e S. Roeder. *Experimental Pulse NMR. A Nuts and Bolts Approach* (Addison-Wesley Publishing Company, 1981).

[169] A. D. Bain e I. W. Burton. Quadrature detection in one or more dimensions. *Concepts. Magn. Res.* **8**, 191 (1996).

[170] D. D. Traficante. Phase-sensitive detection part I: Phase, gates, phase-sensitive detectors, mixers, and the rotating frame. *Concepts. Magn. Res.* **2**, 151 (1990).

[171] D. D. Traficante. Phase-sensitive detection part II: Quadrature phase detection. *Concepts. Magn. Res.* **2**, 181 (1990).

[172] M. S. Anwar, D. Blazina, H. A. Carteret, S. B. Duckett, T. K. Halstead, J. A. Jones, C. M. Kozak e R. J. K. Taylor. Preparing high purity initial states for nuclear magnetic resonance quantum computing. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 040501 (2004).

[173] R. Schack e C. M. Caves. Classical model for bulk-ensemble NMR quantum computation. *Phys. Rev. A* **60**, 4354 (1999).

[174] 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 (não publicado).

[175] K. F. Pál e T. Vértesi. Efficiency of higher dimensional Hilbert spaces for the violation of Bell inequalities. *Phys. Rev. A* **77**, 042105 (2008).

[176] F. DeZela. Single-qubit tests of Bell-like inequalities. *Phys. Rev. A* **76**, 042119 (2007).

[177] A. M. Souza, M. S. Reis, D. O. Soares-Pinto, I. S. Oliveira e R. S. Sarthour. Observation of thermal entanglement in spin clusters via magnetic susceptibility measurements. *Phys. Rev. B* **77**, 104402 (2008).

[178] A. J. Berkley, H. Xu, R. C. Ramos, M. A. Gubrud, F. W. Strauch, P. R. Johnson, J. R. Anderson, A. J. Dragt, C. J. Lobb e F. C. Wellstood. Entangled macroscopic quantum states in two superconducting qubits. *Science* **300**, 1548 (2003).

[179] M. Steffen, M. Ansmann, R. C. Bialczak, N. Katz, E. Lucero, R. McDermott, M. Neeley, E. M. Weig, A. N. Cleland e J. M. Martinis. Measurement of the entanglement of two superconducting qubits via state tomography. *Science* **313**, 1423 (2006).

[180] X. Wang e P. Zanardi. Quantum entanglement and Bell inequalities in Heisenberg spin chains. *Phys. Lett. A* **301**, 1 (2002).

[181] M. R. Dowling, A. C. Doherty e S. D. Bartlett. Energy as an entanglement witness for quantum many-body systems. *Phys. Rev. A* **70**, 062113 (2004).

[182] G. Tóth. Entanglement witnesses in spin models. *Phys. Rev. A* **71**, 010301(R) (2005).

[183] L. A. Wu, S. Bandyopadhyay, M. S. Sarandy e D. A. Lidar. Entanglement observables and witnesses for interacting quantum spin systems. *Phys. Rev. A* **72**, 032309 (2005).

[184] O. Gühne, G. Tóth e H. Briegel. Multipartite entanglement in spin chains. *New J. Phys.* **7**, 229 (2005).

[185] O. Gühne e G. Tóth. Energy and multipartite entanglement in multidimensional and frustated spin models. *Phys. Rev. A* **73**, 052319 (2006).

[186] Č. Brukner e V. Vedral. Macroscopic thermodynamical witnesses of quantum entanglement. ArXiv:quant-ph/0406040 (não publicado).

[187] M. Wieśniak, V. Vedral e Č. Brukner. Quantum entanglement from the third law of thermodynamics. ArXiv:quant-ph/0508193 (não publicado).

[188] X. Wang. Thermal and ground-state entanglement in Heisenberg XX qubit rings. *Phys. Rev. A* **66**, 034302 (2002).

[189] X. Wang e Z. D. Wang. Thermal entanglement in ferrimagnetic chains. *Phys. Rev. A* **73**, 064302 (2006).

[190] M. Asoudeh e V. Karimipour. Thermal entanglement of spins in mean-field clusters. *Phys. Rev. A* **73**, 062109 (2006).

[191] K. D. Wu, B. Zhou e W. Q. Cao. Thermal entanglement in a four-qubit Heisenberg spin model with external magnetic fields. *Phys. Lett. A* **362**, 381 (2007).

[192] M. A. Continentino. Bose-Einstein condensation and entanglement in magnetic systems. *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 8395 (2006).

[193] S. E. Shawish, A. Ramšak e J. Bonča. Thermal entanglement of qubit pairs on the Shastry-Sutherland lattice. *Phys. Rev. B* **75**, 205442 (2007).

[194] J. Hide, W. Son, I. Lawrie e V. Vedral. Witnessing macroscopic entanglement in a staggered magnetic field. *Phys. Rev. A* **76**, 022319 (2007).

[195] Č. Brukner, V. Vedral e A. Zeilinger. Crucial role of quantum entanglement in bulk properties of solids. *Phys. Rev. A* **73**, 012110 (2006).

[196] T. Vértesi e E. Bene. Thermal entanglement in the nanotubular system $Na_2V_3O_7$. *Phys. Rev. B* **73**, 134404 (2006).

[197] T. G. Rappoport, L. Ghivelder, J. C. Fernandes, R. B. Guimarães e M. A. Continentino. Experimental obsevation of quantum entanglement in low-dimensional spin systems. *Phys. Rev. B* **75**, 054422 (2007).

[198] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh e V. Vedral. Entanglement in many-body systems. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).

[199] G. D. Chiara, Č. Brukner R. Fazio, G. M. Palma e V. Vedral. A scheme for entanglement extraction from a solid. *New J. Phys.* **8**, 95 (2006).

[200] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci e R. Fazio. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature* **416**, 608 (2002).

[201] T. J. Osborne e M. A. Nielsen. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Phys. Rev. A* **66**, 032110 (2002).

[202] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico e A. Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).

[203] L. A. Wu, M. S. Sarandy e D. A. Lidar. Quantum phase transitions and bipartite entanglement. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250404 (2004).

[204] L. A. Wu, M. S. Sarandy, D. A. Lidar e L. J. Sham. Linking entanglement and quantum phase transitions via density-functional theory. *Phys. Rev. A* **74**, 052335 (2006).

[205] M. . Wieśniak, V. Vedral e Č. Brukner. Magnetic susceptibility as a macroscopic entanglement witness. *New. J. Phys.* **7**, 258 (2005).

[206] M. S. Reis, A. M. dos Santos, V. S. Amaral, P. Brandão e J. Rocha. Homometallic ferrimagnetism in the zig-zag chain compound $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$. *Phys. Rev. B* **73**, 214415 (2006).

[207] A. M. dos Santos, P. Brandão, A. Fitch, M. S. Reis, V. S. Amaral, e J. Rocha. Synthesis, crystal structure and magnetic characterization of $Na_2Cu_5(Si_2O_7)_2$: An inorganic ferrimagnetic chain. *J. Solid State Chem.* **180**, 16 (2007).

[208] M. S. Reis, A. M. dos Santos, V. S. Amaral, A. M. Souza, P. Brandão, J. Rocha, N. Tristan, R. Klingeler, B. Büchner, O. Volkova e A. N. Vasiliev. Specific heat of clustered low dimensional magnetic systems. *J. Phys.:Condens. Matter* **19**, 446203 (2007).

[209] K. M. O'Connor e W. K. Wootters. Entangled rings. *Phys. Rev. A* **63**, 052302 (2001).

[210] C. Tsallis. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988).

[211] C. Tsallis, S. Lloyd e M. Baranger. Peres criterion for separability through nonextensive entropy. *Phys. Rev. A* **63**, 042104 (2001).

[212] Č. Brukner e A. Zeilinger. Conceptual inadequacy of the Shannon information in quantum measurements. *Phys. Rev. A* **63**, 022113 (2001).

[213] F. Giraldi e P. Grigolini. Quantum entanglement and entropy. *Phys. Rev. A* **64**, 032310 (2001).

[214] S. Abe. Nonadditive information measure and quantum entanglement in a class of mixed states of an N^n system. *Phys. Rev. A* **65**, 052323 (2002).

[215] S. Abe e A. K. Rajagopal. Quantum entanglement inferred by the principle of maximum nonadditive entropy. *Phys. Rev. A* **60**, 3461 (1999).