

Computação Quântica via Ressonância Magnética Nuclear

Roberto S. Sarthour, Juan D. Bulnes, Salvador B. Belmonte,

Alberto P. Guimarães e Ivan S. Oliveira

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rua Dr. Xavier Sigaud 150, Rio de Janeiro - 22290-180, Brazil Janeiro, 2002

RESUMO A Ressonância Magnética Nuclear pulsada (RMN) é hoje apontada como uma das principais técnicas para a implementação de algoritmos quânticos. Cinquenta anos de história de desenvolvimento desta técnica, aliada ao seu baixo custo e fácil manuseio a colocaram nesta posição. Nesta monografia, a RMN é apresentada e discutida enquanto ferramenta para a Computação Quântica (CQ). Primeiramente é feita uma revisão das bases da técnica, incluindo efeitos da relaxação detecção do sinal e o “hardware” básico. São apresentadas seqüências de pulsos relevantes para a CQ, que permitem a criação de estados pseudo-puros e chaves lógicas, com exemplos de espectros simulados. São discutidas também a criação de estados quânticos emaranhados (estados EPR), utilizados em circuitos de teleporte quântico, que possivelmente atuarão como subrotina para transferência de informação em computadores quânticos do futuro. Alguns algoritmos importantes, como o algoritmo de busca de Grover, transformada de Fourier quântica (TFQ) e o algoritmo de fatoração de Shor são discutidos. A simulação de um experimento de teleporte via RMN é descrita. São apresentados e discutidos exemplos de implementações experimentais via RMN de portas lógicas e algoritmos, retirados da literatura.

Contents

1	Introdução	1
2	Elementos de Ressonância Magnética Nuclear Pulsada	2
2.1	Hamiltoniano Hiperfino e Equação de Schrödinger	3
2.2	Sistema com Dois Spins $I = 1/2$ Acoplados	7
2.3	Matriz Densidade e Origem do Sinal da RMN	9
2.4	Relaxação	11
2.5	“Hardware” da RMN	11
2.6	FIDs, Ecos de Spins, e Espectroscopia de RMN	13
3	Computação Quântica	17
3.1	Portas Lógicas e Circuitos Quânticos	18
4	Criação de Portas Lógicas via RMN	23
4.1	Criação do OU-Exclusivo, ou XOR	23
4.2	Criação de Estados Pseudo-Puros	27
4.2.1	Estados Pseudo-Puros Através de Médias	27
4.2.2	Estados Pseudo-Puros Através da Rotulagem de Qubit Lógico	28
4.3	Criação de Estados Emaranhados (estados EPR)	30
4.4	Simulação de um Experimento de Teleporte Quântico via RMN	32
4.5	O Algoritmo de Grover	42
4.6	Transformada de Fourier Quântica	46
4.7	O Algoritmo de Shor	48
4.8	Dificuldades Experimentais	50
5	Exemplos de Implementações de Portas Lógicas e Algoritmos Quânticos Através da RMN em Líquidos	52
5.1	Implementação de Estados Pseudo-Puros e XOR	52
5.2	Implementação do Algoritmo de Grover	56
5.3	Implementação do Algoritmo de Shor	57
5.4	Implementação da Subrotina de Teleporte	59

1 Introdução

Poucos assuntos na física contemporânea despertam tanto interesse e curiosidade quanto a computação quântica. A revolução tecnológica promovida nos últimos 50 anos pelos computadores está no centro deste interesse. A junção de algo tão poderoso, *computação*, com a mais “misteriosa e soberana” das teorias físicas, a *mecânica quântica*, sugere que “computação quântica” deva ser alguma coisa capaz de superar todas as maravilhas científicas e tecnológicas da atualidade. De fato, é provável que em pouco tempo a computação quântica adquira os níveis de popularidade dos buracos negros da cosmologia ou das bombas atômicas da física nuclear. Cedo ou tarde (e é melhor que seja “cedo”) as faculdades ligadas à tecnologia da informação serão forçadas a incluir em seus currículos cursos de computação quântica. Do ponto de vista científico, pequenas maravilhas ligadas à computação quântica já estão presentes nas revistas, nos jornais especializados, e na mídia em geral. Vários experimentos demonstrando a implementações de chaves lógicas e algoritmos quânticos por ressonância magnética nuclear e outras técnicas experimentais foram realizados até a presente data, incluindo situações curiosas de emaranhamento e teleporte de estados nucleares, originalmente demonstrado com fótons por Bouwmeester e colaboradores [1].

Uma das figuras centrais associada às primeiras idéias foi Richard Feynman, quem afirmou por ocasião de um encontro de uma sociedade de óptica [2]: “aparentemente as Leis da Física não se opõem à redução do tamanho dos computadores até que os bits cheguem a dimensões atômicas, região onde a Mecânica Quântica detém o controle.” As observações de Feynman foram feitas em meados dos anos 80, mas o assunto ganhou importância estratégica somente após os trabalhos de Grover sobre busca [3] e Shor sobre fatoração [4], ao final dos anos 90. Na mesma época, os trabalhos de Isaac Chuang, Neil Gershenfeld e outros [13, 14] colocaram a ressonância magnética nuclear (RMN) no topo da fila das candidatas entre as técnicas experimentais para implementação de algoritmos quânticos.

O objetivo principal desta monografia é mostrar como e porque a RMN adquiriu este status. Para a comunidade de RMN não deixa de ser um triunfo ver esta nova “revolução” promovida pela técnica, pouco mais de vinte anos após sua primeira grande revolução, que foram as primeiras imagens tomográficas produzidas por Paul Lauterbur e Peter

Mansfield no início dos anos 70, tão populares e úteis para a clínica médica dos dias de hoje. Quando o então jovem Erwin Hahn, recém doutor da Universidade de Illinois, descobriu o fenômeno que ele batizou de *ecos de spin* em 1950, jamais poderia imaginar que vinte anos depois da sua descoberta, a RMN pulsada estaria produzindo imagens de organismos vivos em pleno funcionamento, e menos ainda que quase 50 anos depois sua descoberta seria usada para fazer computação quântica.

2 Elementos de Ressonância Magnética Nuclear Pulsada

Nesta seção é feita uma revisão de alguns conceitos básicos da RMN, particularmente de sua forma pulsada. Ênfase é dada aos aspectos mais relevantes para o uso desta técnica na computação quântica.

A Ressonância Magnética Nuclear Pulsada (RMN) surgiu com o trabalho de E. Hahn em 1950 [5], apenas quatro anos depois da formulação matemática dada por Bloch [6]. Ao contrário da sua versão “contínua” original, onde a resposta magnética de spins nucleares é detectada no regime estacionário, na RMN pulsada é o sinal transiente que segue como resposta a determinadas seqüências de pulsos de radiofrequência, a quantidade de interesse. Existem dois destes sinais transientes: o *FID* (sigla em inglês para *Free Induction Decay* - Decaimento da Indução Livre) e o *eco de spin*. Ambos sinais medem a amplitude da magnetização nuclear transversal à direção do campo hiperfino estático local (usualmente considerado ao longo da direção z).

No que diz respeito às aplicações da RMN pulsada na computação quântica, dois aspectos destacam esta técnica em relação às outras técnicas de matéria condensada:

(1) O isolamento dos spins nucleares de sua vizinhança (outros núcleos, átomos em moléculas, rede cristalina, etc.) tornam possível a manutenção de estados quânticos coerentes por intervalos de tempo longos o suficiente para que várias operações lógicas possam ser realizadas;

(2) A grande habilidade da RMN pulsada para criar estados macroscópicos coerentes, os chamados “estados pseudo-puros”, bem como a sua manipulação para criar superposições, emaranhados de EPR, etc.

O objetivo desta seção é introduzir elementos de RMN pulsada que permitam o leitor

compreender como esta técnica é aplicada em computação quântica. Para um tratado de RMN recomendamos o excelente livro de C.P. Slichter [7].

2.1 Hamiltoniano Hiperfino e Equação de Schrödinger

A RMN é sensível às interações magnéticas e elétricas entre momentos de multipolos nucleares e campos eletromagnéticos locais. Estas interações são chamadas de *interações hiperfinas*. Os momentos nucleares mais importantes para as interações hiperfinas são: o momento de dipolo magnético, $\boldsymbol{\mu}$, e o momento de quadrupolo elétrico, Q . O primeiro é uma medida da distribuição de correntes no núcleo, e o segundo é uma medida da distribuição de cargas no mesmo. O momento magnético é proporcional ao spin nuclear, $\mathbf{I}$:

$$(1) \quad \boldsymbol{\mu} = \gamma_n \hbar \mathbf{I} = \frac{\gamma_n}{2\pi} h \mathbf{I}$$

onde $\gamma_n/2\pi$ é o chamado *fator giromagnético nuclear*, usualmente expresso em megahertz por tesla (MHz/T)¹. Esta quantidade nos diz qual a frequência de precessão que um momento magnético adquire ao ser submetido a um campo magnético. Por exemplo, um núcleo com $\gamma_n/2\pi = 1$ MHz/T, em um campo de 5 T adquirirá uma frequência de rotação de 5 MHz, e assim por diante.

Núcleos com spin $I = 1/2$ não possuem momento de quadrupolo elétrico. Até o presente momento, todos os exemplos de implementações de algoritmos e chaves lógicas na CQ através da RMN utilizaram-se de núcleos com spin 1/2 (normalmente ^1H e ^{13}C), e portanto a contribuição elétrica para a interação hiperfina pode ser descartada, o que simplifica consideravelmente o problema.

Com isto, o hamiltoniano hiperfino de um núcleo com momento $\boldsymbol{\mu}$ em um campo magnético $\mathbf{B}$ será simplesmente:

$$(2) \quad \mathcal{H} = - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Supondo-se que o campo magnético tem magnitude B_0 e aponta na direção z , $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$, obtemos:

$$(3) \quad \mathcal{H} = -\gamma_n \hbar B_0 I_z$$

¹Normalmente γ_n é definido como o fator giromagnético. A incorporação do “ 2π ” na definição permite expressar sua unidade em MHz/T, o que é conveniente do ponto de vista experimental. A unidade de γ_n , no entanto, é o rad/sT.

Como o lado direito desta equação deve ter dimensão de energia, vemos que o produto $\gamma_n B_0$ deve ter dimensão de frequência angular. Esta é a chamada *frequência de Larmor*, ω_L , e está para o sistema “momento-campo” assim como a massa de um objeto e a constante elástica de uma mola estão para o sistema “massa-mola”.

As autoenergias de (3) são:

$$(4) \quad E_m = -\hbar\omega_L m$$

onde $m = -I, \dots, +I$. Para um único spin com $I = 1/2$, teremos somente dois níveis de energia, $E_0 = -\hbar\omega_L/2$ correspondente a $m = +1/2$, e $E_1 = +\hbar\omega_L/2$ correspondente a $m = -1/2$. A separação em energia é de $\Delta E = \hbar\omega_L$. Obviamente:

$$I_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_z$$

onde σ_z é a componente z das matrizes de Pauli.

Os autovetores, representados pelos kets $|+\rangle$ e $|-\rangle$ são:

$$(5) \quad |+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Com isto, pode-se facilmente verificar que

$$\mathcal{H}|+\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\omega_L|+\rangle$$

$$\mathcal{H}|-\rangle = +\frac{1}{2}\hbar\omega_L|-\rangle$$

A RMN lida com transições entre níveis Zeeman nucleares, induzidas por campos magnéticos variando no tempo. Suponha então que sobreposto ao campo B_0 exista um campo magnético dependente do tempo, cuja amplitude B_1 seja muito pequena para alterar os níveis Zeeman, definidos por B_0 [8]. Por razões de simplicidade, é conveniente que tal campo seja escrito como:

$$(6) \quad B_1 = B_1[\cos(\omega t)\hat{x} + \sin(\omega t)\hat{y}]$$

Ou seja, B_1 representa um “campo girante” no plano xy , perpendicular à direção do campo estático.

É interessante analisarmos a evolução do sistema em função do tempo, quando sujeito aos dois campos magnéticos, o estático e o girante. A equação de Schrödinger será:

$$(7) \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \{-\hbar\omega_L I_z - \hbar\omega_1 [I_x \cos(\omega t) + I_y \sin(\omega t)]\} |\psi\rangle$$

Usando a identidade [7]:

$$e^{-i\theta I_z} I_x e^{i\theta I_z} = I_x \cos\theta + I_y \sin\theta$$

obtemos:

$$(8) \quad \begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= \{-\hbar\omega_L I_z - \hbar\omega_1 [e^{-i\omega t I_z} I_x e^{i\omega t I_z}]\} |\psi\rangle = \\ &= -\hbar e^{-i\omega t I_z} (\omega_L I_z + \omega_1 I_x) e^{i\omega t I_z} |\psi\rangle \end{aligned}$$

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

$$|\psi'\rangle = e^{i\omega t I_z} |\psi\rangle$$

obtemos a relação:

$$-i\hbar e^{i\omega t I_z} \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hbar\omega I_z |\psi'\rangle - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle$$

Substituindo esta relação em (8), obtemos a equação de Schrödinger para $|\psi'\rangle$:

$$(9) \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = -\hbar[(\omega_L + \omega)I_z + \omega_1 I_x] |\psi'\rangle$$

Este resultado é muito importante, pois nesta nova equação a dependência temporal do hamiltoniano desapareceu. De fato, a equação (9) pode ser interpretada como descrevendo o movimento de um núcleo cujo momento magnético interage com um campo magnético efetivo dado por:

$$B_{ef} = B_1 \hat{x} + (B_0 + \frac{\omega}{\gamma_n}) \hat{z}$$

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

A solução de (9) pode ser escrita como:

$$(10) \quad |\psi'(t)\rangle = e^{-i[(\omega_L + \omega)I_z + \omega_1 I_x]t} |\psi'(0)\rangle$$

Neste ponto aparece a importância do fenômeno da RMN: como ω é um parâmetro externo, podemos escolher um valor particular, tal que $\omega_L + \omega = 0$, o que obviamente

ocorre para $\omega = -\omega_L$. Nesta condição dizemos que o campo está em ressonância com o movimento do momento nuclear. A situação é equivalente a excitarmos um sistema massa-mola com uma força externa que oscila na frequência natural do sistema, $\omega = \sqrt{k/m}$. Na ressonância, portanto, $|\psi'\rangle$ evolui de acordo com:

$$(11) \quad |\psi'(t)\rangle = e^{-i\omega_1 I_x t} |\psi'(0)\rangle$$

O operador $e^{-i\omega_1 I_x t}$ provoca uma rotação de $|\psi(0)\rangle$ em torno do eixo x . Para o caso de spin $I = 1/2$, podemos escrever este operador em termos da matriz de Pauli σ_x [8]:

$$(12) \quad e^{-i\omega_1 I_x t} = 1 \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \sigma_x$$

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

$$(13) \quad R_x(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

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

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

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

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

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

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

Ou seja, tal pulso cria uma superposição dos autoestados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ que se pode facilmente verificar ser autoestado de I_y . É precisamente esta habilidade da RMN manipular estados que a torna uma poderosa ferramenta para a computação quântica, como será visto adiante.

2.2 Sistema com Dois Spins $I = 1/2$ Acoplados

Suponha que agora tenhamos dois spins, que vamos chamar de spin A e spin B , que interagem com o campo estático e entre si, com energia de acoplamento dada por $\hbar\omega^{AB}$. Por hipótese, a frequência de acoplamento é muito menor do que as frequências de A e B individuais de interação com o campo estático, ou seja, $\omega^{AB} \ll \omega_A, \omega_B$. O hamiltoniano hiperfino pode ser escrito neste caso como:

$$(14) \quad \mathcal{H} = -\hbar\omega_L^A I_z^A - \hbar\omega_L^B I_z^B + \hbar\omega^{AB} I_z^A I_z^B$$

Haverá então quatro estados de base: $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $| - + \rangle$ e $|--\rangle$, onde o primeiro sinal se refere ao estado de A e o segundo de B . Daqui para frente estes estados serão representados por $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ e $|11\rangle$, respectivamente. As autoenergias serão também em número de quatro:

$$(15) \quad \begin{aligned} E_{++} &= -\frac{1}{2}\hbar\omega_L^A - \frac{1}{2}\hbar\omega_L^B + \frac{1}{4}\hbar\omega_L^{AB} \\ E_{+-} &= -\frac{1}{2}\hbar\omega_L^A + \frac{1}{2}\hbar\omega_L^B - \frac{1}{4}\hbar\omega_L^{AB} \\ E_{-+} &= +\frac{1}{2}\hbar\omega_L^A - \frac{1}{2}\hbar\omega_L^B - \frac{1}{4}\hbar\omega_L^{AB} \\ E_{--} &= +\frac{1}{2}\hbar\omega_L^A + \frac{1}{2}\hbar\omega_L^B + \frac{1}{4}\hbar\omega_L^{AB} \end{aligned}$$

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

As matrizes de Pauli escritas na mesma base são:

$$(16) \quad \begin{aligned} \sigma_x^A &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y^A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z^A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \sigma_x^B &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y^B = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z^B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Os autovetores são:

$$(17) \quad |00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

$$(18) \quad R_x^A(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \\ i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & i & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad R_y^A(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

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

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

Ou seja:

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

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

Passemos agora à evolução temporal do sistema. O procedimento para a eliminação da dependência temporal no hamiltoniano é idêntico àquele do caso onde havia somente 1 spin. O hamiltoniano efetivo se torna:

$$(19) \quad \mathcal{H}_{ef} = -\hbar(\omega_L^A + \omega)I_z^A - \hbar(\omega_L^B + \omega)I_z^B - \hbar\omega_1^A I_x^A - \hbar\omega_1^B I_x^B + \hbar\omega^{AB} I_z^A I_z^B$$

O campo oscilante pode agora ser “sintonizado” para o spin A ou B , separadamente. A solução da equação de Schrödinger será, como anteriormente:

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

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

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

Ou seja, o pulso gira o spin A de $\pi/2$, mas o estado final possui uma pequena mistura dos estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$. Esta mistura será menor quanto maior for a diferença entre as frequências de Larmor entre os dois spins. Para uma separação em frequência de 100 MHz, o termo de mistura se torna $0,001i|01\rangle$.

2.3 Matriz Densidade e Origem do Sinal da RMN

As seções anteriores trataram da dinâmica quântica de 1 e 2 spins em campos magnéticos. A principal conclusão até aqui foi a de que podemos manipular estados Zeeman nucleares com grande precisão através da RMN pulsada. Contudo, em um experimento de RMN não lidamos com 1 ou 2 spins, mas com amostras macroscópicas contendo 10^{23} spins por unidade de volume. Sob a ação de um campo estático, estes spins distribuem-se estatisticamente nos níveis de energias do sistema (dois no caso se 1 spin e 4 no caso de 2 spins acoplados), que portanto deve ser tratado dentro do formalismo de matriz densidade. Além disto, em uma amostra macroscópica, os spins inevitavelmente se acoplam às suas vizinhanças, de forma que se perturbado por alguma ação externa tal como pulsos de radiofrequência, o sistema sempre retornará ao equilíbrio após um certo intervalo de tempo. Este fenômeno é chamado de “relaxação” e será discutido na próxima seção. Nesta seção serão discutidas propriedades básicas da matriz densidade do sistema acoplado.

No equilíbrio térmico, a uma temperatura T , a matriz densidade de um sistema com hamiltoniano $\mathcal{H}$ é dada por [9]:

$$(20) \quad \rho_{eq} = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z}$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$, e $Z = \text{Tr}\{\exp(-\beta\mathcal{H})\}$ é a função de partição. Para o caso em que $\mathcal{H}$ representa spins nucleares interagindo com campos magnéticos, mesmo a temperaturas muito baixas, como a 4,2 K, temperatura do hélio líquido, a energia térmica será muitas

ordens de grandeza maior do que a energia magnética. Por exemplo, tomando para o momento magnético de um núcleo o magneton nuclear, $\mu_n = 3,15 \times 10^{-8}$ eV/T, em um campo de 10 T a energia magnética será $E \approx 3,15 \times 10^{-7}$ eV, enquanto que a energia térmica a 4,2 K será $k_B T \approx 3,62 \times 10^{-4}$ eV. Portanto, $E/k_B T \approx 10^{-3}$. Conseqüentemente, na maioria das situações, podemos fazer a seguinte aproximação em (20):

$$(21) \quad \rho_{eq} \approx \frac{1}{Z} - \frac{\beta}{Z} \mathcal{H}$$

Nesta aproximação, a matriz densidade do sistema acoplado será aproximadamente simétrica, pois o espectro de $\mathcal{H}$ exibe esta propriedade se o acoplamento não for muito intenso. Por exemplo, se substituirmos $\omega^A/2\pi = 100$ MHz, $\omega^B/2\pi = 50$ MHz e $\omega^{AB}/2\pi = 1$ MHz, obtemos $E_{++}/h = -74,75$ MHz, $E_{+-}/h = -25,25$ MHz, $E_{-+}/h = 24,75$ MHz e $E_{--}/h = 75,25$ MHz. Substituindo $Z \approx 4$, válido no limite de altas temperaturas, teremos:

$$(22) \quad \rho_{eq} \approx \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{10^{-2}}{4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,75 \end{pmatrix}$$

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

A segunda propriedade importante de (21) é a seguinte: sabemos que a manipulação dos estados nucleares é representada por transformações unitárias sobre a matriz densidade. Representemos uma destas operações genericamente por U . Sendo uma matriz unitária, U possui a seguinte propriedade: $UU^+ = 1$. Conseqüentemente, sua ação sob ρ_{eq} será:

$$(23) \quad U\rho_{eq}U^+ \approx \frac{1}{Z} - \frac{\beta}{Z} U\mathcal{H}U^+$$

Ou seja, embora o segundo termo seja muito menor que o primeiro, somente ele sofre transformação sob a ação de U . O primeiro termo atua como um mero “background” que não contribui para a evolução do sistema. Como a manipulação dos estados em RMN se dá através de transformações unitárias, tais como pulsos de $\pi/2$, o sinal detectado será

proveniente somente do segundo termo de ρ_{eq} . Isto permite a observação da evolução de estados pseudo-puros em um “background” formado por uma mistura estatística uniforme.

Estas são as características principais da matriz densidade de equilíbrio do sistema acoplado.

2.4 Relaxação

No que diz respeito à evolução temporal do sistema, as interações entre os spins em uma amostra volumétrica e sua vizinhança são, em RMN, caracterizadas por dois parâmetros chamados de *tempos de relaxação spin-spin* e *spin-rede*, T_2 e T_1 , respectivamente. T_1 representa uma escala de tempo para as interações entre os spins nucleares e a rede, formada por elétrons atômicos, elétrons itinerantes (no caso de metais), excitações elementares, tais como fônons, mágnons (no caso de sistemas magnéticos ordenados), etc. O primeiro parâmetro, T_2 , é uma escala de tempo para que as interações entre os spins leve a um “equilíbrio interno” entre eles [7].

A importância destes tempos para a CQ via RMN está no fato de que tais interações levam à destruição da coerência dos estados quânticos, e portanto destroem o processo computacional, que depende crucialmente da manutenção desta coerência.

T_1 é sempre maior ou igual a T_2 . Nos líquidos estes tempos podem chegar a vários segundos, assim como nos sólidos isolantes. Ambos os tempos aumentam a baixas temperaturas, devido ao decréscimo da agitação térmica. Nos isolantes ordenados magneticamente, a relaxação é da ordem de dezenas a centenas de milisegundos, e nos metais caem para a faixa das dezenas a centenas de microsegundos, devido à presença de elétrons de condução.

Como regra geral, qualquer algoritmo em um computador quântico à base de RMN, deve ser executado em um tempo no máximo da ordem de T_2 . Isto pode representar de centenas a milhares de operações.

2.5 “Hardware” da RMN

Na prática, operações sobre o sistema de spins são realizadas em espectrômetros de RMN. No futuro, com o desenvolvimento da CQ, os computadores serão de certa forma espectrômetros ultra-sofisticados.

Os componentes básicos de um espectrômetro de RMN são:

(A) Gerador de radiofrequência (sintetizador) - Responsável pela geração do campo B_1 oscilante. Equipamentos comerciais geram sinais que variam de alguns MHz até alguns GHz;

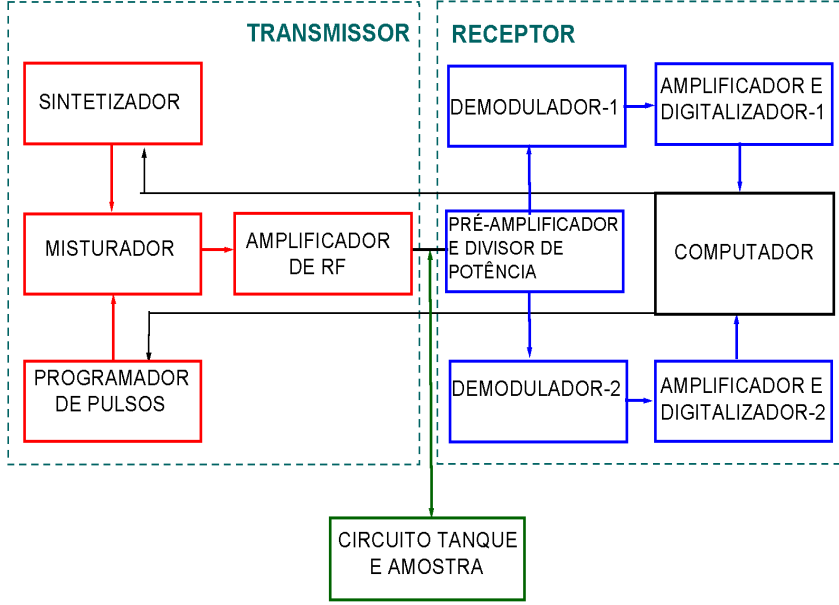
(B) Programador de Pulsos - Responsável pela modulação do campo de radiofrequência na forma de pulsos. Determina a duração e separação entre os pulsos. Larguras de pulsos variam entre alguns nanosegundos a milisegundos. Como regra geral, a largura dos pulsos deve ser muito menor do que T_2 ;

(C) Amplificador de Potência - Os sinais gerados no sintetizador são de baixa potência, tipicamente alguns mW. Para que B_1 seja apreciável, é preciso amplificá-lo. Isto é feito pelo amplificador de potência. Podem variar de alguns W até alguns kW, nos espectrômetros comerciais.

(D) Circuito Tanque - Basicamente um circuito RLC que contém a amostra sob investigação. No caso de um computador quântico, a amostra seria o equivalente à central de processamentos.

O campo estático pode ser gerado em eletro-ímãs (tipicamente 1 a 2 T), ou bobinas supercondutoras (8 a 20 T). Nos materiais ordenados magneticamente o campo estático é gerado internamente e pode chegar a várias dezenas de tesla.

O conjunto formado por (A), (B) e (C) compõe o que se chama o *transmissor* de um espectrômetro de RMN. A saída do amplificador de potência é conectada ao circuito tanque. A resposta da amostra à excitação da radiofrequência pode ser detectada conectando-se uma bobina de “pick-up” posicionada junto à amostra, a um bloco responsável pela amplificação e exibição do sinal, chamado de *receptor*. Na prática, o próprio circuito de excitação é utilizado como “pick-up”. A figura a seguir mostra de forma esquemática a arquitetura básica de um espectrômetro de RMN. Para uma discussão detalhada sobre o “hardware” de RMN, veja [10].



Esquema básico de um espectrômetro de RMN pulsada com dois canais de detecção

2.6 FIDs, Ecos de Spins, e Espectroscopia de RMN

A magnetização nuclear de equilíbrio pode ser obtida diretamente da matriz densidade (22) através da relação:

$$(24) \quad M_{eq} = Tr\{\rho_{eq}(\mu_z^A + \mu_z^B)\} = \hbar Tr\{\rho_{eq}(\gamma_n^A I_z^A + \gamma_n^B I_z^B)\}$$

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

Contudo, em RMN pulsada não se mede M_{eq} , mas sim as componentes x e y da magnetização após seqüências de pulsos de radiofrequência. Portanto, os observáveis em RMN são grandezas *fora* do equilíbrio. Através da aplicação de *pulsos seletivos* em um sistema acoplado, pode-se medir as componentes da magnetização dos spins A e B em separado. Como exemplo, considere um pulso de $\pi/2$ sobre o spin A , aplicado ao longo da direção x . A matriz de rotação correspondente é dada em (18):

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

Sob tal pulso, a matriz densidade de equilíbrio² se transforma como:

$$\begin{aligned}
 \rho &= R_x^A(\pi/2)\Delta\rho R_x^A(\pi/2)^+ = \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \\ i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & i & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,75 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -i \\ -i & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 (25) \qquad &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 2i & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2i \\ -2i & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -2i & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

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

$$M_y^A = Tr\{\rho I_y^A\} = 1/2 \quad e \quad M_y^B = Tr\{\rho I_y^B\} = 0$$

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

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

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

A detecção da RMN via ecos de spins tem a vantagem de eliminar os efeitos de inhomogeneidades do campo estático B_0 . Contudo, para fins de CQ o uso desta técnica representa

²Vamos chamar de $\Delta\rho$ a parte diferente da unidade da matriz densidade de equilíbrio, ou seja, a parte que se transforma sob operações unitárias.

de certa forma um “desperdício” de tempo, uma vez que devemos esperar um intervalo igual a $2\Delta\tau$ a partir da aplicação do primeiro pulso até a detecção do sinal. Porém, em situações de T_2 longo a técnica de ecos pode apresentar vantagens sobre a detecção através do FID.

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

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

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

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

Olhando para os elementos de matriz de $I_x^A = (1/2)\sigma_x^A$ em (23), por exemplo, vemos que os únicos elementos não nulos são:

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

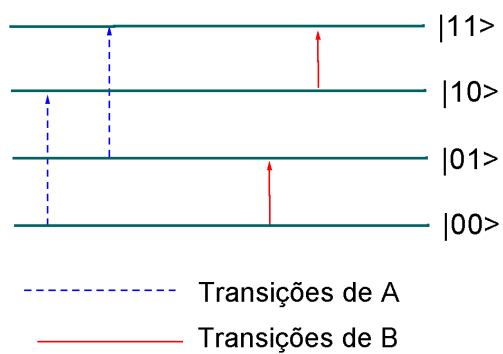
sendo que o primeiro e terceiro, assim como o segundo e o quarto, representam a mesma transição, nas frequências respectivas de:

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

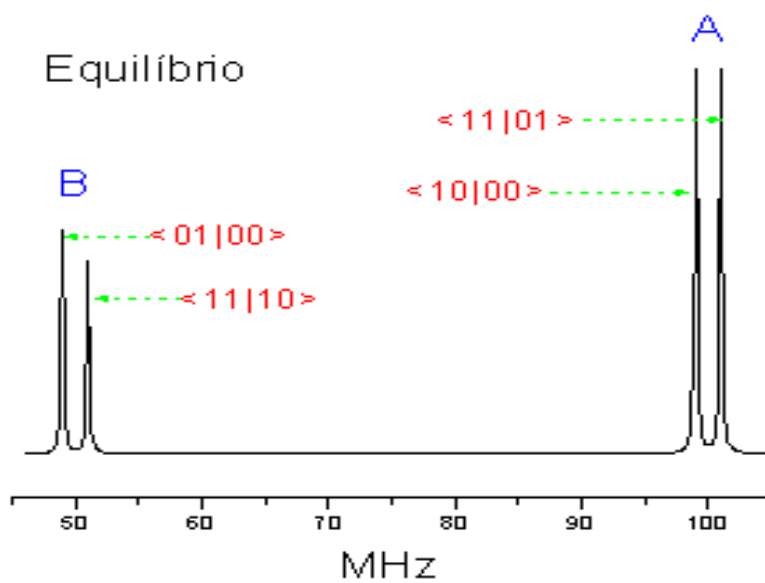
Assim, o espectro de RMN do spin A será composto por dois picos centrados nestas frequências. O espectro de B será similar ao de A , porém centrado nas frequências

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

A figura a seguir mostra o espectro de equilíbrio calculado a partir do que foi descrito acima, com as linhas de absorção indexadas pelas respectivas transições.



Transições permitidas em um sistema com 2 spins que interagem fracamente entre si.



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

3 Computação Quântica

Os conceitos fundamentais de um sistema de dois valores (sistema binário) foram desenvolvidos por volta de 1850 pelo matemático inglês George Boole. Boole publicou em 1954 o livro *An Investigation of the Laws of Thought* (“Uma Investigação das Leis do Raciocínio”). Nesta obra foi apresentada a análise matemática da lógica binária que forneceu os fundamentos da eletrônica digital. Em 1938 Claude E. Shannon, um pesquisador do MIT, apresentou uma teoria sobre um método de representação de circuitos constituídos por chaves e relés, instituídas nas bases da lógica binária booleana. As técnicas de Shannon, relacionadas na época somente a circuitos digitais com relés eletromagnéticos e chaves elétricas foram, posteriormente, adaptadas a circuitos eletrônicos com válvulas termoiônicas e semicondutores, sem perder a sua identidade estrutural e simbologia original. Sua teoria, publicada com o título *Symbolic Analysis of Relays and Switching Circuits* (“Análise Simbólica dos Circuitos de Chaveamento e Circuitos de Relés”), estabeleceu as bases operacionais da eletrônica digital. A lógica booleana é binária, o que significa que o nosso raciocínio classifica as informações (sinais) disponíveis em duas classes: verdadeiras e falsas. Atribuímos ao sinal verdadeiro o símbolo matemático 1 e ao falso o símbolo 0. A álgebra booleana é completamente definida em um conjunto que possui dois elementos (1 e 0), sobre os quais podem ser executadas três operações básicas: produto booleano (correspondente ao operador AND), soma booleana (correspondente ao operador OR) e inversor booleano (correspondente ao operador NOT).

A computação automática foi iniciada com o projeto de uma máquina de tecnologia mecânica, proposta pelo cientista inglês Charles Babbage em 1833. Esta máquina já possuía os elementos de um computador moderno: unidades aritméticas, unidades de controle e memória. A realização prática mecânica não se concretizou em função do seu tamanho gigantesco e complexidade mecânica, além da capacidade tecnológica da época. Em 1946 apareceram os primeiros computadores com tecnologia de relés eletromecânicos: eram eles o MARK I e MARK II da Universidade de Harvard. Estes computadores eram praticamente máquinas calculadoras, com menor rendimento que as atuais calculadoras de bolso. Em 1946 foi construído o ENIAC, o primeiro computador eletrônico. Possuía 18.000 válvulas eletrônicas e necessitava de uma usina elétrica para sua alimentação. A evolução dos computadores prosseguiu com o primeiro computador transistorizado, o

TRADIC da *Bell Laboratories*, em 1954. Em 1960 começou a era dos computadores com circuitos integrados. Em 1968 surgiram os primeiros microcomputadores.

A peça fundamental dos computadores modernos é a Unidade Central de Processamento (UCP) ou microprocessador. Um microprocessador básico é composto por: Unidade Lógica e Aritmética (ULA), Diversos Registradores, Contador de programa, Circuito para decodificação de instrução, Seção de controle e temporização, etc. A maioria dos microprocessadores atuais possui instruções para somar, subtrair multiplicar e dividir números binários. No entanto, para se obter, por exemplo, o seno de um determinado número o computador executa um algoritmo, que pode variar de acordo com a linguagem de programação em uso. Uma solução é desenvolver a série de Taylor da função (no caso seno) e criar uma subrotina. Assim, se o usuário do computador desejar encontrar o valor de $\sin(x)$ o microprocessador irá interpretar tal comando como uma série de soma e produtos, retornado ao usuário, após muitos pulsos de “clock” (os microprocessadores só executam uma única instrução, de soma ou produto, por vez) o resultado da função.

3.1 Portas Lógicas e Circuitos Quânticos

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

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

AND			OR		
A	B	V	A	B	V
0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	1	1
1	0	0	1	0	1
1	1	1	1	1	1

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

XOR		
A	B	V
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Existem ainda duas portas muito importantes em eletrônica digital. São elas a porta NAND (AND invertida) e a porta NOR (OR invertida). Associando portas de mesma função (NAND ou NOR) é possível construir qualquer porta lógica fundamental (AND, OR ou NOT). Devido a esta propriedade, as portas lógicas NAND e NOR são auto-suficientes para o desenvolvimento de qualquer expressão lógica. Em outras palavras, qualquer sistema digital pode ser construído utilizando apenas com portas lógicas NAND ou NOR.

Quanticamente, bits são representados por objetos que possuem dois estados, que neste caso são denominados *qubits*. No caso da RMN, spins nucleares com $I = 1/2$, em campos magnéticos, representam qubits. No caso de somente 2 spins acoplados, convencionase que o estado de menor energia, $|++\rangle$, é o estado lógico $|00\rangle$, e o de maior energia, $|--\rangle$, o estado lógico $|11\rangle$. Os estados intermediários são $|01\rangle$ e $|10\rangle$. O conjunto $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ é denominado *base computacional*.

Em 1995, Barenco e co-autores [11] demonstraram que, analogamente ao que ocorre em um computador clássico, em um computador quântico qualquer ação computacional pode ser implementada a partir de portas lógicas elementares. Contudo, ao contrário do que ocorre classicamente, o XOR quântico seria a única porta a dois qubits necessária para se construir qualquer outra, com operações a 1 qubit.

A matriz que representa o XOR quântico para 2 qubits é a seguinte:

$$(26) \quad XOR_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

É fácil verificar que a ação de XOR sobre os elementos da base computacional gera os seguintes resultados:

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

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

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

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

Comparando com a tabela verdade do caso clássico, vemos que de fato o estado do spin B reproduz a terceira coluna da tabela, enquanto que o estado do spin A não muda. Diz-se que A é o *bit de controle*. A matrix que representa XOR com bit de controle em B é:

$$(27) \quad XOR_B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

É fácil verificar que:

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

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

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

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

Um importante operador, que denominaremos P_1 , é obtido com a seguinte seqüência:

$$(28) \quad P_1 = XOR_B XOR_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Este operador inverte as posições dos elementos da matriz densidade, porém mantendo sua forma diagonal. Aplicado em $\Delta\rho$, P_1 produz o seguinte resultado:

$$P_1 \Delta \rho P_1^+ = \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,75 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -0,25 \end{pmatrix}$$

Observe que a operação mantém a forma diagonal da matriz densidade, *como se fosse um estado de equilíbrio com as populações trocadas*. P_1 é utilizado na criação de estados pseudo-puros, como será visto na próxima seção.

Uma operação importante a um ou dois qubits é a chamada *transformação de Walsh-Hadamard*, representada por H . Para um qubit temos:

$$(29) \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

A dois qubits, H será:

$$(30) \quad H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

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

$$(31) \quad H|00\rangle = \frac{1}{2} [|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle]$$

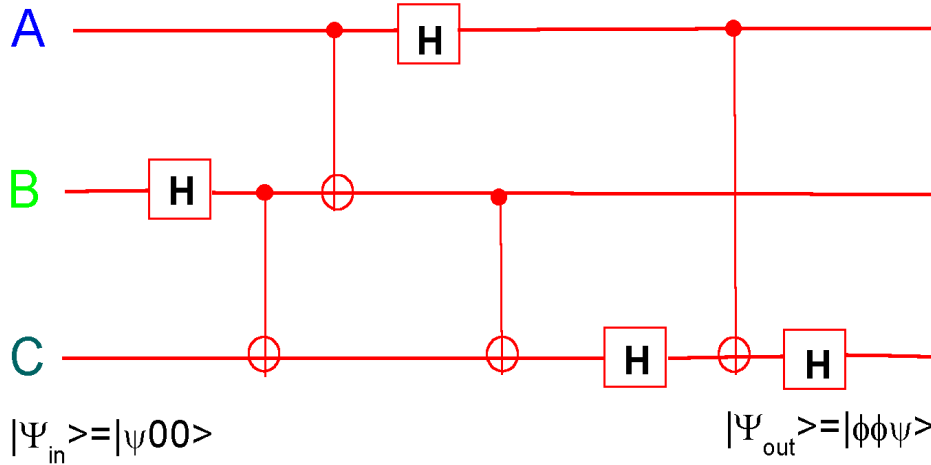
Como será visto na próxima seção, as portas acima podem ser criadas através de seqüências de pulsos de radiofrequência, aplicadas nas ressonâncias dos spins A e B . Existe uma operação adicional a dois qubits, $T^{AB}(\pi/2)$, que não é gerada por pulsos, mas obtida simplesmente deixando-se o sistema evoluir livremente sob a ação do operador que descreve a interação entre A e B , $\hbar\omega^{AB}I_z^A I_z^B$, na ausência dos pulsos. A matriz que a representa é:

$$(32) \quad T^{AB}(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-i \end{pmatrix}$$

Circuitos quânticos são seqüências de operações aplicadas a estados quânticos, e são o equivalente das “rotinas” em um computador clássico. Três etapas envolvem a execução de uma rotina em um computador quântico ideal:

- (1) Preparação do estado inicial;
- (2) Realização dos algoritmos;
- (3) Leitura do resultado.

Um exemplo de circuito quântico é mostrado na figura a seguir. Este circuito é devido a Brassard e colaboradores [12]. Os estados iniciais dos qubits A , B e C são: $|\psi\rangle$, $|0\rangle$ e $|0\rangle$, respectivamente. Após a execução do circuito, o estado de cada qubit na saída se torna: $|\phi\rangle$, $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$. Ou seja, o estado de A passou para C . Este circuito executa uma operação de *teleporte quântico*, e será explorado em detalhes na seção 4.



Exemplo de circuito quântico. Este circuito, devido a Brassard e colaboradores [12], realiza o teleporte do estado do qubit A para C.

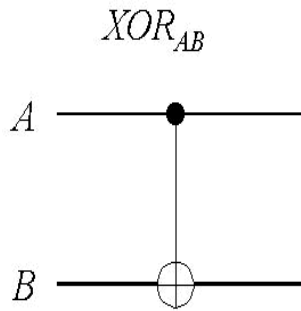
4 Criação de Portas Lógicas via RMN

Nesta seção são apresentadas seqüências específicas de pulsos de radiofrequência que criam as portas lógicas discutidas na seção anterior. Simulações são feitas sobre a atuação dessas portas no espectro de RMN de dois spins acoplados.

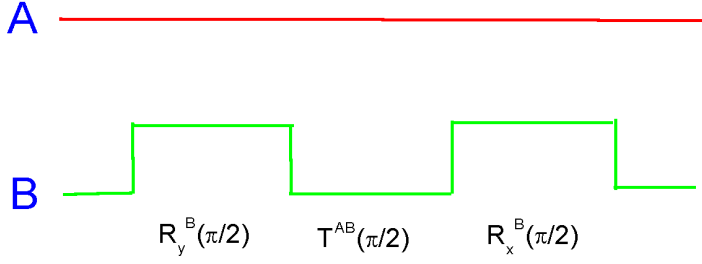
4.1 Criação do OU-Exclusivo, ou XOR

O Ou-Exclusivo, ou XOR, é a única porta lógica a dois qubits necessária em algoritmos quânticos. Esta porta fundamental ocorre em vários circuitos. A figura abaixo mostra o símbolo do XOR quântico, e a seguinte uma seqüência de pulsos devido a Chuang e colaboradores [13] que cria uma porta XOR_A . Repare que a seqüência envolve rotações do spin B em torno de x e y , bem como a evolução natural do sistema devida à interação

$\hbar\omega^{AB}$:



Representação da porta XOR quântica. As duas linhas horizontais representam os dois qubits. A linha vertical representa o fato de que a operação envolve os dois qubits. O círculo fechado representa o qubit de controle, e o aberto representa o qubit controlado.



Seqüência de pulsos para criar XOR_A .
 A seqüência que cria XOR_B é idêntica, exceto pelo fato de que o qubit de controle passa a ser B.

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

A seqüência que cria XOR_B é:

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

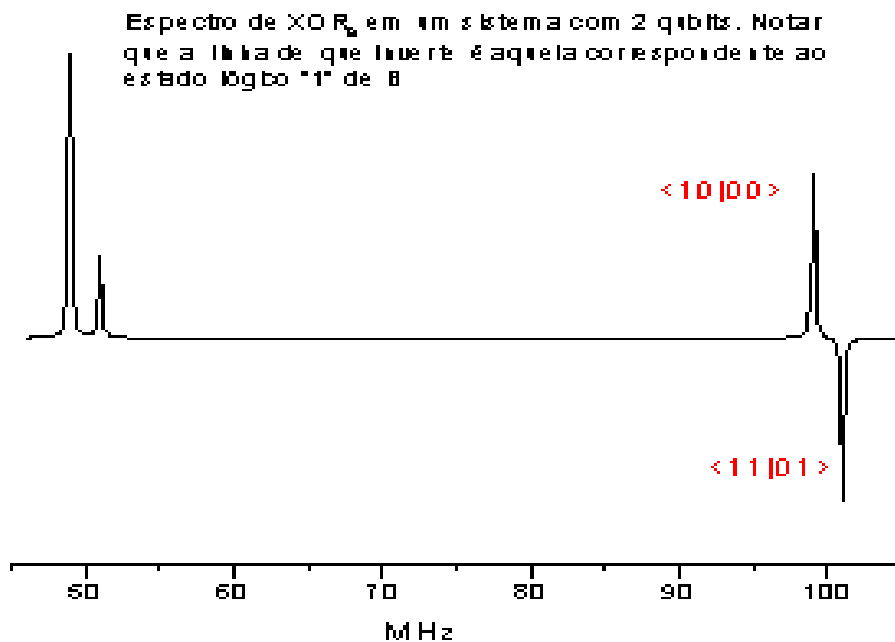
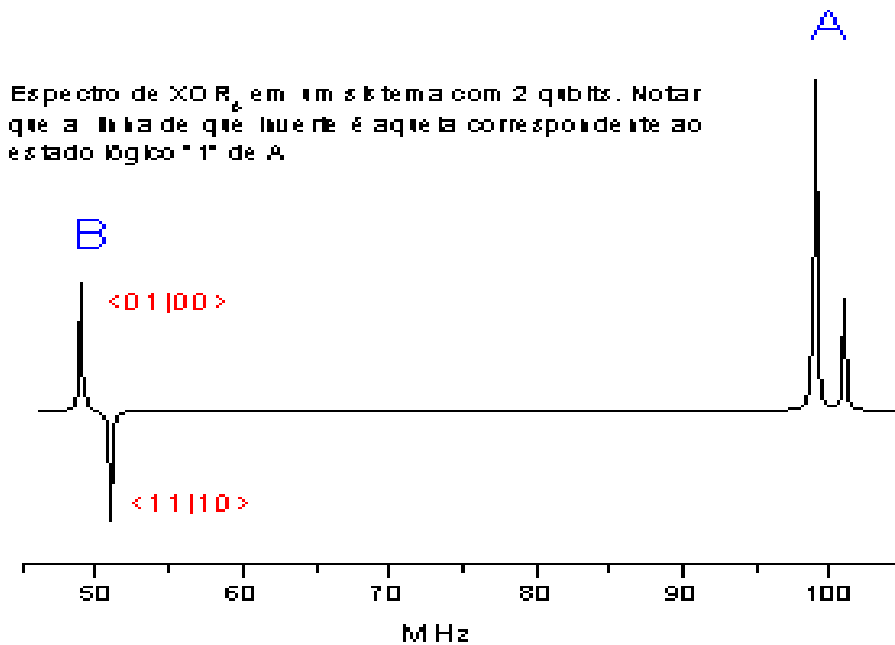
Ao calcularmos explicitamente as seqüências da figura mostrada acima, verificamos os resultados:

$$(33) \quad \begin{aligned} XOR_A &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1+i \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \end{pmatrix} \\ XOR_B &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1+i \\ 0 & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Portanto, o XOR criado por RMN difere em fase do “XOR ideal”. O operador P_1 obtido das seqüências XOR acima será:

$$(34) \quad P_1 = XOR_B XOR_A = \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A figura a seguir mostra espectros calculados de XOR com controles em A e B. Repare que a linha do qubit controlado se inverte somente se o bit de controle for ‘1’.



Vamos ver abaixo algumas das principais implementações de circuitos.

4.2 Criação de Estados Pseudo-Puros

À primeira vista, RMN e computação quântica são disciplinas fundamentalmente antagônicas, pois RMN lida com “ensembles” contendo uma infinidade de spins em misturas estatísticas, enquanto que a computação quântica lida com a manipulação de estados coerentes. Contudo, Chuang e colaboradores [15] demonstraram como estados “pseudo-puros” poderiam ser criados a partir de um ensemble estatístico. Das técnicas utilizadas, destacam-se aquela em que o resultado final é obtido como a média de vários experimentos, e a que utiliza um qubit lógico como “rotulagem” na identificação de estados pseudo-puros. Estas duas técnicas são discutidas a seguir.

4.2.1 Estados Pseudo-Puros Através de Médias

Considere uma sequência XOR que cria o operador P_1 de (34). A ação deste operador sobre ρ_{eq} em (22) resulta em:

$$(35) \quad P_1 \rho_{eq} P_1^+ = \rho_1 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 10^{-4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,75 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0,25 \end{pmatrix}$$

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

$$(36) \quad P_1^+ \rho_{eq} P_1 = \rho_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 10^{-4} \begin{pmatrix} -0,75 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,75 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,25 \end{pmatrix}$$

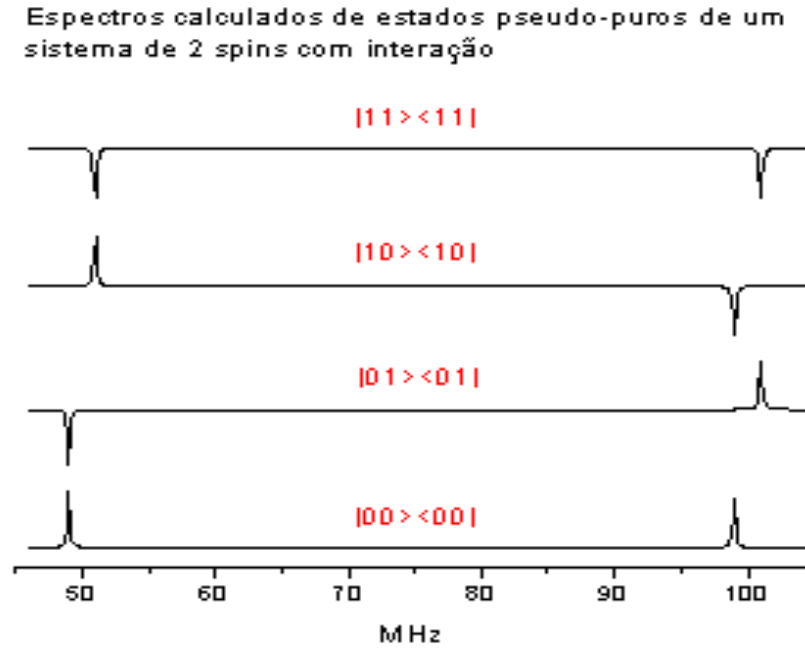
Fazendo a média $(\rho_{eq} + \rho_1 + \rho_2)/3 = \bar{\rho}$, obtém-se:

$$(37) \quad \bar{\rho} = \left(\frac{1}{4} - 0,75 \times 10^{-4} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 10^{-4} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ou seja, a média resulta em uma matriz unitária - que portanto não sofre transformação - mais uma matriz que representa um sistema onde *todos* os spins estão no estado puro $|00\rangle$! Esta matriz pode ser escrita genericamente como:

$$\bar{\rho} = \alpha 1 + \beta |00\rangle\langle 00|$$

onde $\beta \ll \alpha$. Este é o chamado *estado pseudo-puro*. Embora muito menor que a unidade, em um experimento de RMN, somente o segundo termo de $\bar{\rho}$ contribuirá para o sinal. É com esta porção ínfima da matriz densidade que as operações em um computador quântico devem ser realizadas. A figura a seguir mostra vários espectros calculados de diferentes estados pseudo-puros em um sistema com 2 qubits.



4.2.2 Estados Pseudo-Puros Através da Rotulagem de Qubit Lógico

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

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

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

resulta em:

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

Ou seja, a operação resultou na inversão das “populações” dos dois últimos estados, $\gamma \leftrightarrow \delta$.

Considere agora o que ocorre com 3 spins, A, B e C . Suponha que no regime de altas temperaturas, as populações de equilíbrio relativas dos estados, em ordem crescente de energia sejam:

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

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

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

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

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

4.3 Criação de Estados Emaranhados (estados EPR)

Em 1935, A.Einstein, B. Podolsky e N. Rosen publicaram um famoso artigo [16] cuja finalidade era a de revelar a “incompletude” da mecânica quântica. A estratégia dos autores foi a de, através de um “experimento pensado”, sugerir que um sistema de duas partículas descrito por uma certa função de onda apresentava correlações à distância entre as partículas envolvidas, que violavam as idéias de localidade da física clássica. Uma situação freqüentemente utilizada na descrição de tais correlações é aquela de duas partículas distantes uma da outra, que têm componentes de spins medidas ao longo de direções arbitrárias, utilizando-se campos magnéticos que podem ser girados independentemente um do outro. Cada medida fornece somente um dos resultados: $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ ou $|11\rangle$. A mecânica quântica prevê que em um estado emaranhado, a probabilidade, $P(00)$ de que em uma dada medida o resultado $|00\rangle$ seja obtido, é proporcional a $\sin^2[(\phi_A - \phi_B)/2]$, onde ϕ_A e ϕ_B são os ângulos que os campos magnéticos fazem com a direção z . Este resultado exhibe obviamente uma correlação não clássica: se posicionarmos os magnetos de modo que $\phi_A - \phi_B = \pi$ teremos certeza de encontrar $|00\rangle$, ao passo que se $\phi_A - \phi_B = 0$ teremos certeza que o resultado *não* será $|00\rangle$. Se fixarmos ϕ_A e variarmos ϕ_B , o resultado encontrado em A dependerá da posição escolhida em B .

Os chamados estados EPR, ou emaranhados, são descritos por funções de onda que não podem ser decompostas como produtos de funções das partículas individuais. Assim, o estado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle)$$

não é emaranhado, pois pode ser escrita como:

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

ao passo que o estado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

não pode ser decomposto como o anterior, e portanto é emaranhado.

A criação de estados emaranhados pode ser realizada em spins nucleares através da RMN. Para dois spins, uma tal seqüência de pulsos utilizada para criar estados EPR é:

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

$$(38) \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & 0 & 1+i & 0 \\ 0 & 1+i & 0 & -1+i \\ 0 & -1-i & 0 & -1+i \\ -1+i & 0 & 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

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

$$EPR|00\rangle = \frac{1-i}{2}(|00\rangle - |11\rangle) = \frac{1-i}{\sqrt{2}}|\Phi^-\rangle$$

$$EPR|01\rangle = \frac{1+i}{2}(|01\rangle - |10\rangle) = \frac{1+i}{\sqrt{2}}|\Psi^-\rangle$$

$$(39) \quad EPR|10\rangle = \frac{1+i}{2}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1+i}{\sqrt{2}}|\Phi^+\rangle$$

$$EPR|11\rangle = \frac{-1+i}{2}(|10\rangle + |01\rangle) = \frac{-1+i}{\sqrt{2}}|\Psi^+\rangle$$

Aplicado à mistura estatística de equilíbrio, $\Delta\rho_{eq}$, EPR produz:

$$(40) \quad EPR\Delta\rho_{eq}EPR^+ = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

$$(41) \quad EPR\Delta\rho_{pp}EPR^+ = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Note que em nenhum dos dois casos, a matriz densidade resultante pode ser escrita como um produto de matrizes de dois spins, $\rho_1 \otimes \rho_2$. Na próxima seção vamos ver como EPR, XOR e H são utilizados em um experimento de teleporte quântico.

4.4 Simulação de um Experimento de Teleporte Quântico via RMN

A idéia de que estados quânticos poderiam ser transferidos de um local X para outro Y sem que a informação precise atravessar o espaço intermediário, é devida à Charles Bennett e colaboradores [17]. O fenômeno é chamado de *teleporte quântico*, e utiliza estados emaranhados. O processo envolve pelo menos três partículas, A , B e C . A partícula A é preparada em um estado desconhecido, $|\psi_A\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, que se deseja teleportar. As partículas B e C são preparadas em um estado EPR, digamos $|\psi_{BC}\rangle = |01\rangle - |10\rangle$ (fatores de normalização ignorados). As partículas a e b se encontram no local X , com “Bob”, e a partícula c está em Y , com “Alice”. O objetivo do experimento é teleportar o estado de A para C .

Como A não faz parte do emaranhamento, a função de onda total das três partículas será:

$$|\psi_{ABC}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_{BC}\rangle = \alpha|001\rangle - \alpha|010\rangle + \beta|101\rangle - \beta|110\rangle$$

A função acima pode ser re-escrita como:

$$|\psi_{ABC}\rangle = \alpha|00\rangle \otimes |1\rangle - \alpha|01\rangle \otimes |0\rangle + \beta|10\rangle \otimes |1\rangle - \beta|11\rangle \otimes |0\rangle$$

Agora, os estados de A e B são re-escritos na base de Bell substituindo:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi^+\rangle + |\Phi^-\rangle)$$

$$|01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi^+\rangle + |\Psi^-\rangle)$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi^+\rangle - |\Psi^-\rangle)$$

$$|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi^+\rangle - |\Phi^-\rangle)$$

Com isto, após re-arrumação dos termos chega-se a:

$$\begin{aligned} |\psi_{ABC}\rangle = & \frac{1}{2}|\Phi^+\rangle \otimes (\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle) + \frac{1}{2}|\Phi^-\rangle \otimes (\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) + \\ & + \frac{1}{2}|\Psi^+\rangle \otimes (-\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) - \frac{1}{2}|\Psi^-\rangle \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \end{aligned}$$

Os termos entre parênteses representam as quatro possibilidades para o estado de C , partícula que se encontra com Alice. Repare que o último termo é justamente o estado

“desconhecido” de A , $|\psi_A\rangle$. Se Bob fizer uma medida, haverá 25% de chance que C “colapse” em $|\psi_A\rangle$. As outras possibilidades diferem de $|\psi_A\rangle$ somente por fatores de fase. Para realizar com sucesso o teleporte, Bob deve então proceder em duas etapas: (1) primeiro ele faz uma medida de A e B . Neste instante, C colapsa para um dos quatro estados possíveis, que Alice ainda desconhece. (2) Bob então lê o resultado de sua medida e avisa Alice por meios clássicos (por exemplo, telefona, manda um fax ou e-mail). Conhecendo o resultado de Bob, Alice pode realizar operações a um qubit de modo a obter $|\psi_A\rangle$ corretamente. Só então ela realiza sua medida, terminando o teleporte.

Note que o processo todo envolve uma parte em que a informação viaja por “meios quânticos” (momento em que Bob faz sua medida), e outra por meios clássicos (telefonema de Bob para Alice). Isto torna impossível que a informação vá de Bob para Alice com velocidade superior à da luz, preservando com isto as restrições impostas pela relatividade restrita. Note ainda que ao realizar sua medida, Bob destrói a informação inicial de A , que reaparece em C , satisfazendo o *teorema da não-clonagem*, que afirma ser impossível clonar um estado quântico [18]. Vamos agora ver como um experimento destes pode ser implementado em RMN.

O ponto de partida é escrever as matrizes dos 3 spins e de rotações na base computacional:

$$\{|ABC\rangle\} = \{|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |100\rangle, |011\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle\}$$

Na matriz σ_x^A abaixo é mostrada a convenção adotada para indexação das linhas e colunas.

$$\sigma_x^A = \left(\begin{array}{cccccccc|c} \langle 000| & \langle 001| & \langle 010| & \langle 100| & \langle 011| & \langle 101| & \langle 110| & \langle 111| & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & |000\rangle \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & |001\rangle \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & |010\rangle \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & |100\rangle \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & |011\rangle \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & |101\rangle \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & |110\rangle \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & |111\rangle \end{array} \right)$$

$$\sigma_x^B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x^C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y^A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y^B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y^C = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z^A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z^B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z^C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

A partir destas matrizes, as matrizes de rotação de $\pi/2$, de qualquer spin $k = A, B, C$, em torno de qualquer eixo $j = x, y, z$ podem ser obtidas facilmente de:

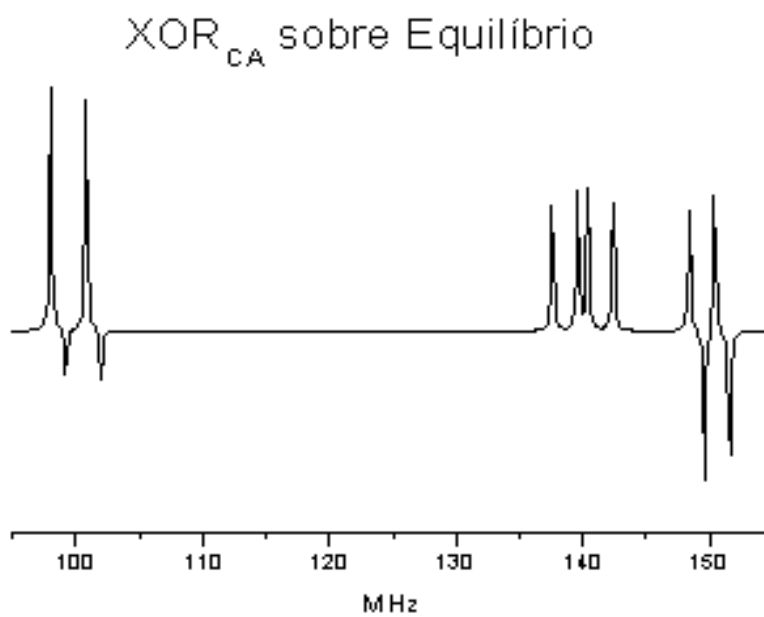
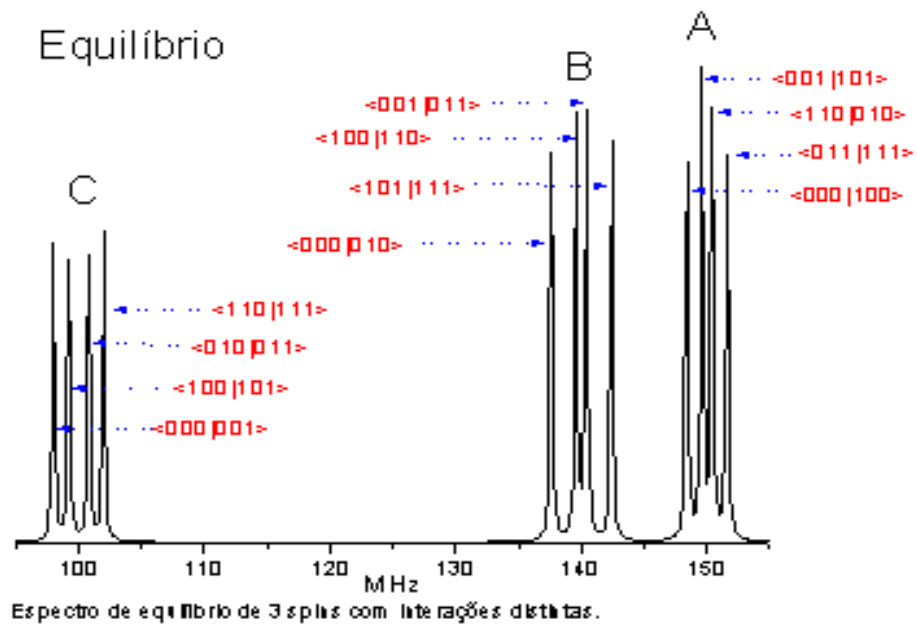
$$R_j^k(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i\sigma_j^k)$$

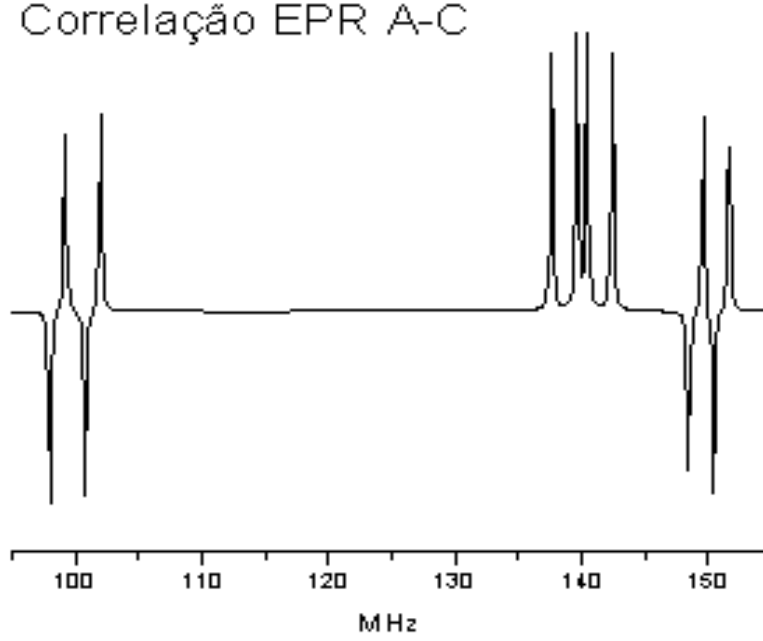
O hamiltoniano efetivo será:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ef} = & -\hbar(\omega_L^A + \omega)I_z^A - \hbar(\omega_L^B + \omega)I_z^B - \hbar(\omega_L^C + \omega)I_z^C - \hbar\omega_1(I_x^A + I_x^B + I_x^C) + \\ (42) \quad & + \hbar\omega^{AB}I_z^A I_z^B + \hbar\omega^{AC}I_z^A I_z^C + \hbar\omega^{BC}I_z^B I_z^C \end{aligned}$$

onde, por simplicidade, foi suposto que os spins possuem a mesma razão giromagnética.

A figura a seguir mostra o espectro de equilíbrio calculado para o caso em que os termos de acoplamento são diferentes um do outro. A transição relativa a cada linha é também mostrada. As outras figuras mostram, respectivamente, os espectros XOR_{AC} e EPR_{BC}. Note que no caso do XOR somente as linhas de C relativas ao estado ‘1’ de A invertem, enquanto B permanece inalterada. No caso EPR as linhas B e C tornam-se correlacionadas.





O circuito que realiza o teleporte de A para C é aquele mostrado na figura na Seção 3.1. Neste circuito ocorrem operações de Hadamard-Walsh a 1 qubit, H . Esta operação leva $|0\rangle$ para $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ e $|1\rangle$ para $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$. Na base $\{|ABC\rangle\}$, H_A , por exemplo, será:

$$H_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

H_B e H_C podem ser calculados sem dificuldade. Estas transformações podem ser implementadas pelas seqüências [26]:

$$H_k = R_x^k(\pi/2)R_x^k(\pi/2)R_{-y}^k(\pi/2)$$

onde $k = A, B, C$.

Na simulação que se segue, utilizaremos operações *XOR* ideais. Por exemplo,

$$XOR_{AB} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

As matrizes XOR_{BC} e XOR_{AC} podem também ser calculadas sem dificuldade. A criação de XOR ideal depende de esquemas de correções de fase sobre a seqüência apresentada anteriormente. Para o teleporte estas correções são fundamentais.

Vamos supor que por algum dos métodos descritos um estado pseudo-puro seja criado, que vamos representar pela matriz:

$$\Delta\rho_{pp} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sobre este estado aplicamos uma rotação em A em torno de x :

$$R_x^A(\pi/2)\Delta\rho_{pp}R_x^A(\pi/2)^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Esta matriz representa a entrada do circuito de teleporte. Ela descreve o estado

$$|ABC\rangle = (|0\rangle + i|1\rangle) \otimes |00\rangle = |000\rangle + i|100\rangle$$

Ao final do circuito, o resultado deverá ser algo como: $|ABC\rangle = |\phi\phi\rangle \otimes (|0\rangle + i|1\rangle)$. Ou seja, o estado final do spin C será igual ao de entrada de A .

A primeira operação do circuito sobre o estado de entrada é H_B , ou seja, uma transformação H-W sobre o spin B . Após esta operação, o estado será:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|000\rangle + |010\rangle + i(|100\rangle + |110\rangle)]$$

A operação seguinte, XOR_{BC} , realiza o emaranhamento entre B e C :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|000\rangle + |011\rangle + i(|100\rangle + |111\rangle)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|00\rangle + |11\rangle) \end{aligned}$$

ou seja, B e C vão para um estado de Bell, $|\Phi^+\rangle = |00\rangle + |11\rangle$. Todas as outras etapas podem ser calculadas sem dificuldade.

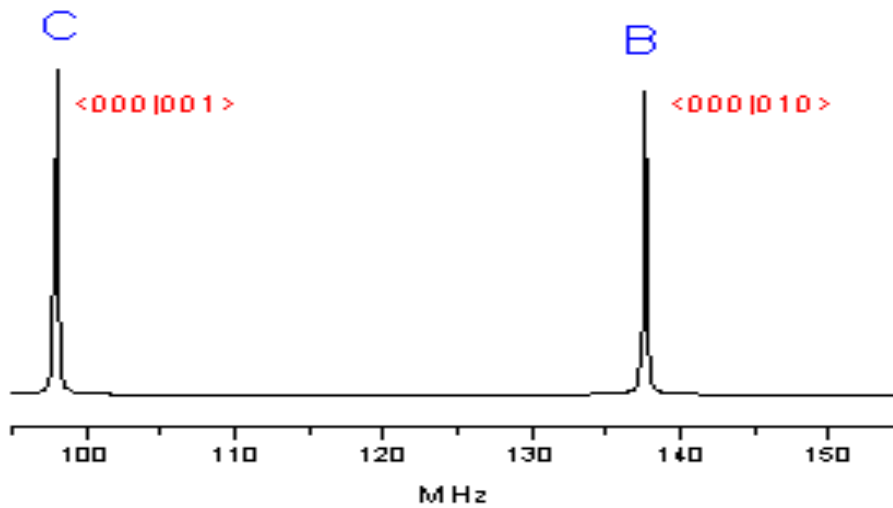
Após a última operação, H_C , aplica-se um pulso de medida sobre C , obtendo-se a seguinte matriz densidade:

$$R_x^C(\pi/2)\Delta\rho_{out}R_x^C(\pi/2)^+ = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

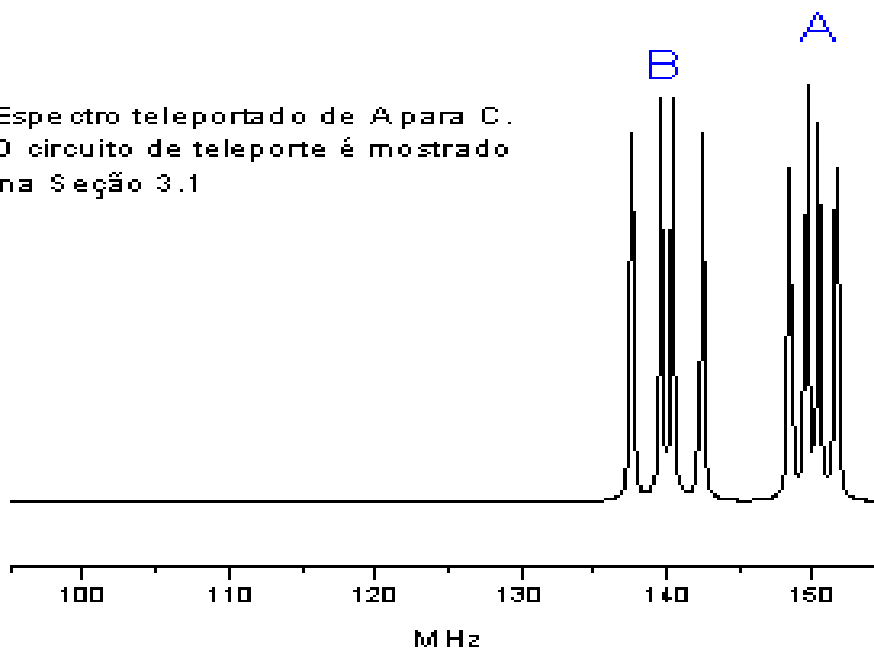
Calculando-se $R_x^A(\pi/2)\Delta\rho_{out}R_x^A(\pi/2)^+$ e $R_x^B(\pi/2)\Delta\rho_{out}R_x^B(\pi/2)^+$, obtém-se o espectro mostrado na figura seguinte. Note que as linhas de C no espectro de saída desapareceram, assim como ocorreu com as de A no espectro de entrada. Ao final, A e B ficaram com espectros similares, representado o estado $|\phi\phi\rangle$.

A implementação experimental do teleporte via RMN foi realizada por M.A. Nielsen e colaboradores em 1998 [28]. Este experimento será discutido na seção 5.

Espectro de entrada no circuito de teleporte
mostrado na Seção 3.1. O espectro é obtido
aplicando-se um pulso de $\pi/2$ na linha de A de um
estado pseudo-puro. O objetivo é teleportar o estado
de A para C.



Espectro teleportado de A para C.
O circuito de teleporte é mostrado
na Seção 3.1



4.5 O Algoritmo de Grover

O algoritmo de Grover [3], com o algoritmo de fatoração de Shor elevou o interesse da CQ do seu aspecto inicial puramente acadêmico para algo tecnologicamente importante. Trata-se de um algoritmo de busca: dada uma lista com N ítems sem nenhuma ordenação, o algoritmo permite que um dado ítem seja encontrado após um número de tentativas da ordem de $\sqrt{N}$, contrastando com algoritmos clássicos que precisariam em média de $N/2$ tentativas. Então, em uma lista contendo 1000 ítems, seriam necessárias cerca de 500 “tentativas clássicas”, mas somente 30 “tentativas quânticas”. Pode ser demonstrado que não existe algoritmo de busca mais eficiente do que o de Grover [18].

A lista é representada pelos autoestados da base computacional. Em um sistema com 2 qubits, ela seria dada por:

$$|00\rangle; |01\rangle; |10\rangle; |11\rangle$$

O ítem procurado seria representado por um destes autoestados.

Em RMN o sistema deverá ser inicializado a partir de um estado pseudo-puro sobre o qual se aplica uma transformação de Walsh-Hadamard com o objetivo de colocá-lo em uma superposição uniforme. A partir daí, uma operação de inversão de fase é aplicada com o objetivo de rotular o estado buscado. Por exemplo, se rotularmos $|11\rangle$, o estado criado a partir da superposição uniforme será:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle]$$

A terceira operação inverte cada estado ao redor da média. O efeito desta operação sobre um estado do tipo

$$|\psi_\alpha\rangle = \sum_k \alpha_k |k\rangle$$

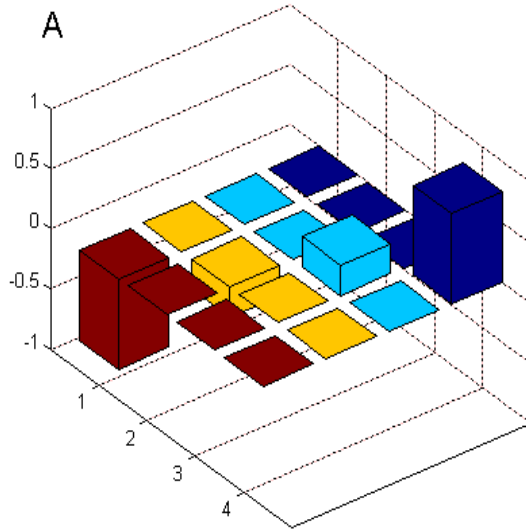
é criar um novo estado

$$|\psi_\beta\rangle = \sum_k \beta_k |k\rangle$$

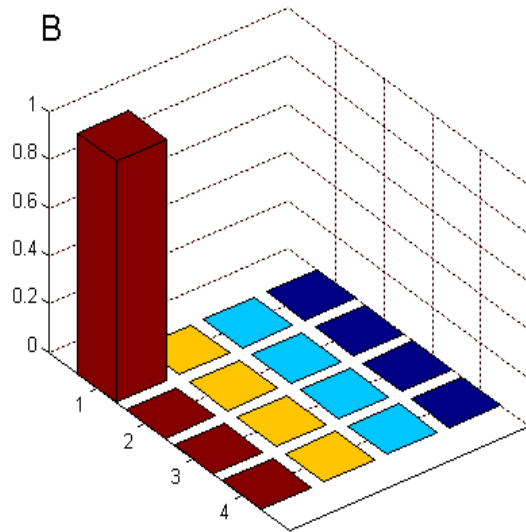
tal que $\beta_k = -\alpha_k + \langle\alpha_k\rangle$, onde $\langle\alpha_k\rangle$ é o valor médio de α_k .

Para dois qubits (lista contendo 4 ítems), uma única aplicação da sequência acima leva ao estado buscado. Em um sistema com N ítems ($N = 2^n$, onde n é o número de qubits), as operações de inversão de fase e inversão em torno da média devem ser aplicadas várias vezes. A cada ciclo a probabilidade de que o ítem buscado seja encontrado aumenta em

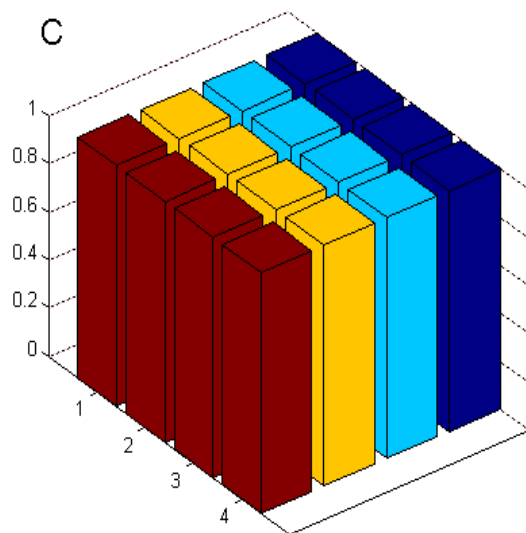
$O(1/\sqrt{N})$, e após $O(\sqrt{N})$ repetições ela será próxima de 1. A figura a seguir mostra a evolução dos elementos de matriz da matriz densidade para o caso de 2 qubits. Neste exemplo, o ítem buscado é o estado $|10\rangle\langle 10|$. Em (A) é mostrado o estado de equilíbrio; em (B) o estado pseudo-puro; em (C) a superposição uniforme, obtida após a aplicação do operador de Hadamard; em (D) o resultado após aplicação do algoritmo apenas 1 vez. Note que no caso clássico, seriam preciso em média 2,25 buscas para que o ítem fosse encontrado.



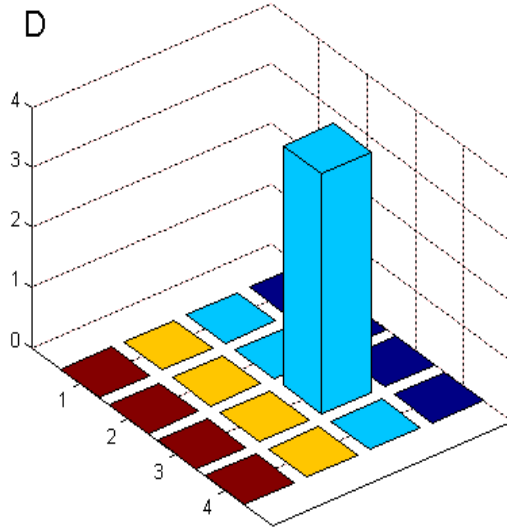
Elementos de matriz de $\Delta\rho$ no equilíbrio para $n = 2$.



Estado pseudo-puro de $\Delta\rho$ para $n = 2$.

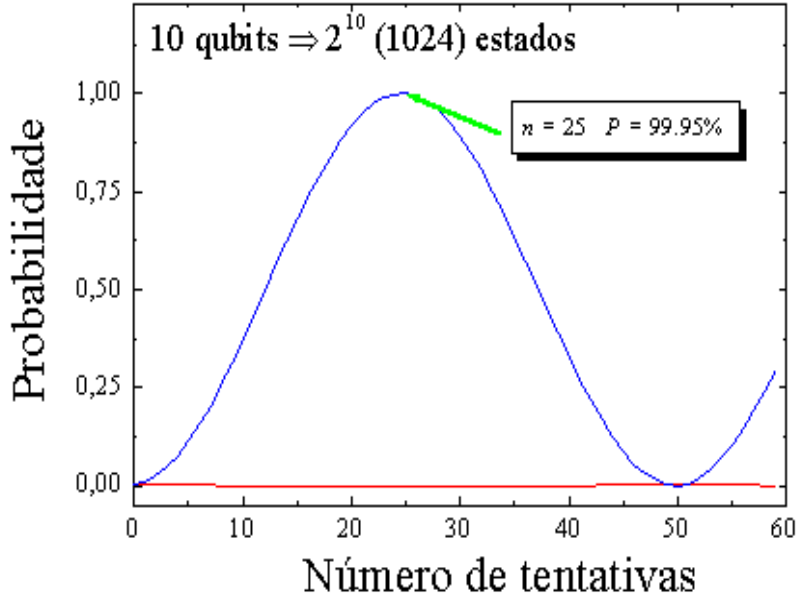


Superposição uniforme obtida do estado pseudo-puro.



Resultado da aplicação do algoritmo de Grover ao estado mostrado na figura anterior. O item rotulado é o estado $|10\rangle\langle 10|$.

A próxima figura mostra uma simulação do algoritmo para o caso $N = 1024$, ou seja, 10 qubits. A linha oscilante representa a probabilidade acumulada de se encontrar o item procurado, em função do número de tentativas. A linha horizontal representa a probabilidade para os outros itens. Um aspecto importante a ser notado é o fato de que o algoritmo é cíclico. Ou seja, se ele for aplicado um número de vezes maior do que o ótimo, a probabilidade de sucesso começa a diminuir. Tal número ótimo foi deduzido por Boyer e colaboradores [21].



Simulação do algoritmo de Grover para 1024 ítems (10 qubits). A linha oscilante representa a probabilidade acumulada de se encontrar o ítem buscado após cada ciclo. A linha horizontal representa a mesma quantidade para qualquer outro ítem da lista.

A implementação experimental do algoritmo de Grover com RMN foi realizada por Chuang e colaboradores [26] e será discutida na seção 5.3.

4.6 Transformada de Fourier Quântica

A chamada transformada de Fourier quântica (TFQ) é uma subrotina essencial em simulações de sistemas físicos e também para o algoritmo de fatoração de Shor (próxima seção). De forma análoga às transformadas de Fourier clássicas, o objetivo da TFQ é revelar propriedades periódicas de funções de onda. O operador que realiza a TFQ em um estado $|x\rangle$ é definido através de:

$$(43) \quad TFQ|x\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{x'=0}^{2^n-1} e^{2\pi i x x' / 2^n} |x'\rangle$$

onde n é o número de qubits. Nesta expressão, x e x' são os inteiros representados sob forma binária nos estados da base computacional. Por exemplo, para $n = 2$, teremos:

x, x'	
<i>bin.</i>	<i>dec.</i>
00	0
01	1
10	2
11	3

Considere a aplicação de TFQ no estado $|11\rangle$:

$$TFQ|11\rangle = \frac{1}{2}[e^{2\pi i 3 \times 0/4}|00\rangle + e^{2\pi i 3 \times 1/4}|01\rangle + e^{2\pi i 3 \times 2/4}|10\rangle + e^{2\pi i 3 \times 3/4}|11\rangle]$$

$$TFQ|11\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle - i|01\rangle - |10\rangle + i|11\rangle]$$

Procedendo da mesma forma para os outros estados da base computacional, obtemos:

$$TFQ|00\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle]$$

$$TFQ|01\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle + i|01\rangle - |10\rangle - i|11\rangle]$$

$$TFQ|10\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle]$$

Portanto, a matriz de TFQ para um sistema com dois qubits é:

$$(44) \quad TFQ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix}$$

Aplicada a uma função com período r , TFQ produz uma nova função que exibirá um máximo em $p = 2^n/r$. Esta propriedade é fundamental para a execução do algoritmo de Shor. O operador pode ser gerado através de transformações de Walsh-Hadamard e deslocamentos de fase. Sua implementação com RMN em um sistema de 3 qubits foi demonstrada recentemente por Weinstein e colaboradores [19].

4.7 O Algoritmo de Shor

O algoritmo de Shor [4] resolve um problema computacionalmente difícil para um computador clássico: a fatoração em números primos de um número inteiro grande³. Na prática, computadores clássicos não conseguem resolver este problema em intervalos de tempo razoáveis para números com algumas centenas de dígitos. De acordo com Steane [18, 20], seria inviável fatorar um número com 300 dígitos com os computadores da atualidade (cujo limite para fatoração é de cerca de 130 dígitos), que levariam milhares de anos para realizar a tarefa. Com o algoritmo de Shor, isto seria possível em apenas alguns dias.

O algoritmo de Shor está intimamente relacionado ao problema de se encontrar o período de uma função [18], e para isto utiliza a transformada de Fourier quântica, discutida na seção anterior. Ele não é aplicável a números pares, nem a potências de números primos. O algoritmo separa os qubits disponíveis em *registros* de entrada e saída (mais detalhes abaixo). Para fatorar um número N , o número m de qubits necessários para os registros de entrada é dado pela relação:

$$N^2 \leq 2^m < 2N^2$$

Para o registro de saída são necessários outros $\lceil \log_2(N) \rceil$ qubits, onde $\lceil x \rceil$ denota o inteiro mais próximo superior a x . Portanto, para fatorarmos o número $15 = 3 \times 5$, por exemplo, seriam necessários 12 qubits, pois:

$$15^2 < 2^8 < 2 \times 15^2 \text{ e } \lceil \log_2(15) \rceil = 4$$

Para fatorarmos um número com 100 dígitos (considerado apenas “mediano”) precisaríamos de nada menos do que 700 qubits!

Estes números claramente impõem severas limitações às eventuais aplicações práticas do algoritmo de Shor, particularmente no que diz respeito à RMN. Eles reforçam a idéia de que novas tecnologias deverão ser criadas antes que todo o potencial da CQ possa ser utilizado.

A aplicação do algoritmo de Shor envolve duas etapas principais, uma delas sendo a determinação do período de uma função. Seja N o número a ser fatorado, e $x < N$ um

³Considera-se “grande” números inteiros com milhares de dígitos.

número que não possua fator comum com N . Por exemplo, $N = 15$ e $x = 7$. Calcule o período da função:

$$f(a) = x^a \text{Mod} N \equiv x^a - N \times \text{int} \left(\frac{x^a}{N} \right)$$

variando o número a . No presente exemplo será suficiente variá-lo de 0 a x . Nesta expressão, “int” significa “a parte inteira”. Então:

$$f(0) = 7^0 \text{Mod} 15 = 1$$

$$f(1) = 7^1 \text{Mod} 15 = 7$$

$$f(2) = 7^2 \text{Mod} 15 = 4$$

$$f(3) = 7^3 \text{Mod} 15 = 13$$

$$f(4) = 7^4 \text{Mod} 15 = 1$$

$$f(5) = 7^5 \text{Mod} 15 = 7$$

$$f(6) = 7^6 \text{Mod} 15 = 4$$

$$f(7) = 7^7 \text{Mod} 15 = 13$$

Vemos então que o período de f é $r = 4$. Calcule agora o máximo divisor comum entre $x^{r/2} + 1 = 50$ e $N = 15$:

$$\text{MDC}(50, 15) = 5$$

Faça o mesmo para $x^{r/2} - 1 = 48$:

$$\text{MDC}(48, 15) = 3$$

Estes são os fatores da decomposição de N : $15 = 3 \times 5$.

Deve-se notar que nem todos os valores de x levaria ao mesmo resultado para o período de f . É claro que em um caso de interesse prático (N muito grande) o período de $f(a)$ não pode ser encontrado por uma inspeção simples como a que foi feita acima. É aqui onde entra a TFQ, utilizada no algoritmo para se determinar tal período.

O uso da TFQ, no entanto, não é o único, nem o mais importante aspecto quântico do algoritmo de Shor. É na preparação do estado inicial onde o poder da mecânica quântica se manifesta. Formalmente, dados n qubits, estes são “separados” em dois grupos, chamados *registros*. Um estado genérico dos registros é representado por $|x\rangle \otimes |y\rangle$. Inicialmente os registros são postos no estado $|0\rangle \otimes |0\rangle$. O registro x é então colocado em uma superposição de estados que representam os números a da função $f(a) = x^a \text{Mod} N$, enquanto que sobre o registro y é aplicada uma transformação, U_f , tal que:

$$U_f|a\rangle \otimes |0\rangle = |a\rangle \otimes |x^a \text{Mod} N\rangle$$

Após estas duas transformações sobre os registros de entrada, o estado do sistema será:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{a=0}^{2^n-1} |a\rangle \otimes |x^a \text{Mod} N\rangle$$

É neste ponto onde aparece o poder do algoritmo de Shor. O estado acima contém todos os valores de $f(a)$, “gravados” nos registros $|y\rangle$, e que foram obtidos simultaneamente com uma única operação, a transformação U_f . Para $n = 100$, por exemplo, isto representaria $2^{100} \approx 10^{30}$ avaliações simultâneas de $f(a)$, um número igual a 1 bilhão de vezes o número de Avogadro! A partir deste ponto, uma medida é feita sobre os registros y e a periodicidade do estado resultante é transferida ao primeiro registro, de onde então é extraída através da TFQ. Veja [18] para uma discussão mais detalhada.

4.8 Dificuldades Experimentais

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

- (i) Relaxação rápida;
- (ii) Inomogeneidade dos campos magnéticos;
- (iii) Baixa amplitude do sinal detectado;
- (iv) Número de qubits.

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

Inhomogeneidades em B_0 também levam à perda de coerência na fase da função de onda. Se tivéssemos três valores para o campo estático, $B_0 - \delta B_0$, B_0 e $B_0 + \delta B_0$, após um pulso de $\pi/2$ os spins precessariam com três frequências diferentes. O campo estático deve ser homogêneo o suficiente para que o desdobramento causado pela interação spin-spin ($\hbar\omega^{AB}$) não seja mascarado pelo alargamento da linha.

Inhomogeneidades em B_1 levam a um estado final diferente daquele desejado. Um pulso de $\pi/2$, por exemplo, é definido pela amplitude e duração do campo oscilante: $\gamma_n B_1 \tau = \pi/2$. Conseqüentemente, a inhomogeneidade em B_1 leva à rotações diferentes de spins em localizações distintas da amostra.

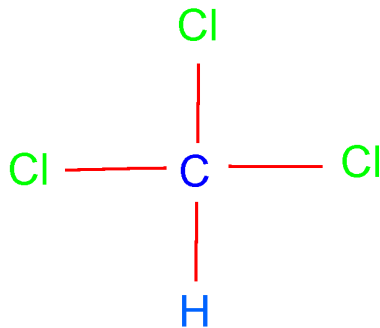
Os itens (iii) e (iv) estão relacionados um ao outro. O futuro tecnológico da CQ via RMN depende do aumento do número de qubits disponíveis na amostra. Um computador quântico com 30 qubits, por exemplo, equivaleria a um computador clássico com cerca de $2^{30} \approx 1$ bilhão de bits. Porém, a medida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

É muito provável que haja de fato um futuro tecnológico para a CQ via RMN, mas isto dependerá do desenvolvimento de novos materiais fabricados artificialmente que possam servir adequadamente ao propósito, e ao desenvolvimento de novas ferramentas lógicas que dependam menos de processos sobre os quais não temos controle.

5 Exemplos de Implementações de Portas Lógicas e Algoritmos Quânticos Através da RMN em Líquidos

5.1 Implementação de Estados Pseudo-Puros e XOR

Knill, Chuang e Laflamme propuseram em 1998 a técnica de médias para criar estados pseudo-puros [22], e testaram em um sistema com dois qubits, a molécula do clorofórmio. A molécula é mostrada esquematicamente na figura abaixo; os dois qubits disponíveis são o ^1H e o ^{13}C . As frequências de ressonância foram: 500,133921 MHz e 500,134136 MHz para o próton, e 125,767534 MHz e 125,767749 MHz para o carbono. O acoplamento medido foi de 0,000215 MHz, e os tempos de relaxação foram $T_1 \approx 7\text{s}$ e $T_2 \approx 2\text{s}$ para o próton, e $T_1 \approx 16\text{s}$ e $T_2 \approx 0,2\text{s}$ para o carbono.



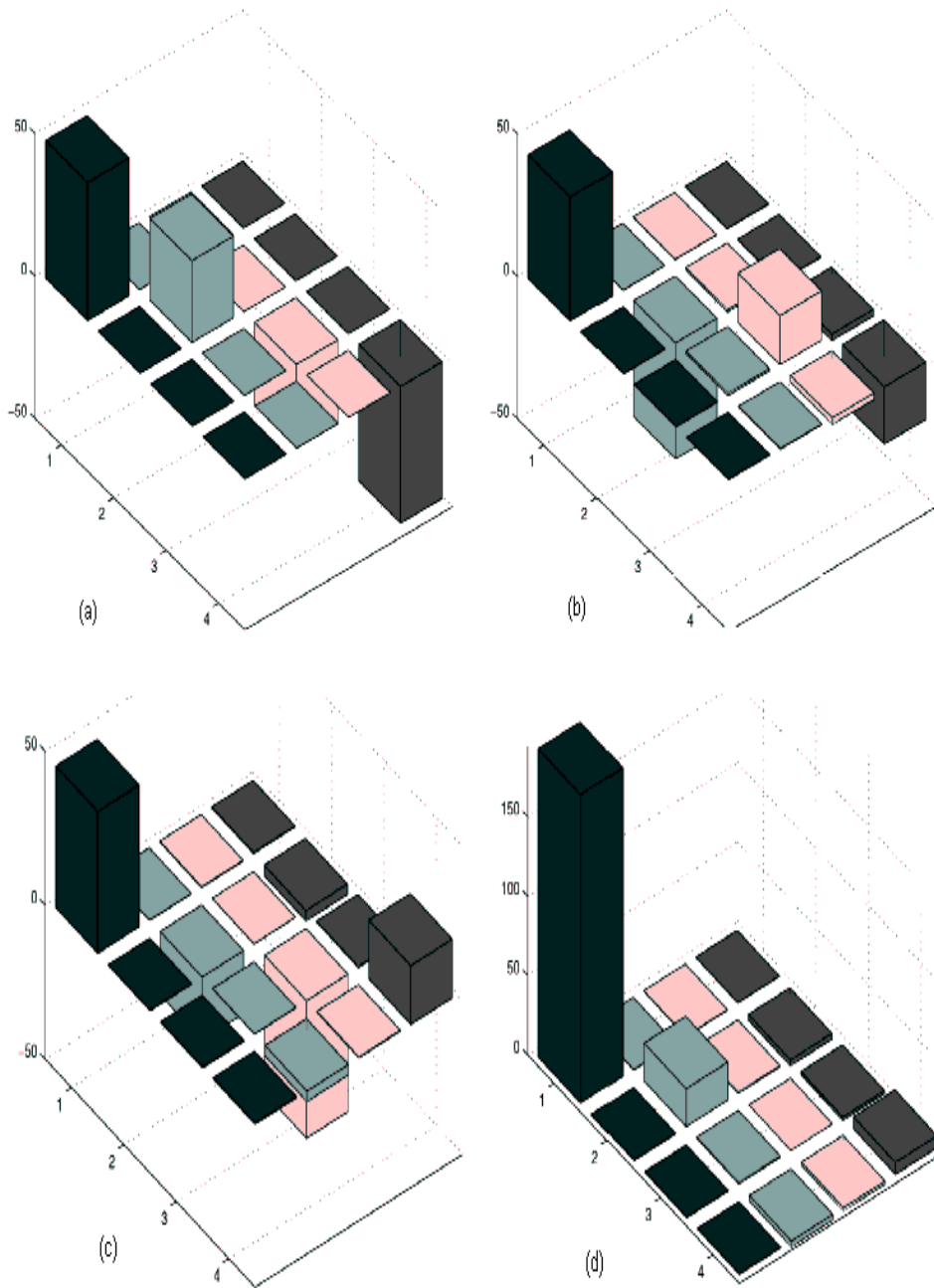
Esquema da molécula do clorofórmio. Os dois qubits utilizados na criação de um estado pseudo-puro são o ^1H e ^{13}C .

As inversões das populações da matriz densidade são obtidas mediante aplicações do operador $P_1 = \text{XOR}_A \text{XOR}_B$, discutido na Seção 4.1. Através de várias seqüências de pulsos, os autores foram capazes de medir todos os elementos da matriz densidade, obtendo o resultado final:

$$\bar{\rho} = \begin{pmatrix} 194 & \epsilon & \epsilon & \epsilon \\ \epsilon & 24 & \epsilon & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon & \epsilon & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon & \epsilon & 8 \end{pmatrix} - 57\mathbf{1}$$

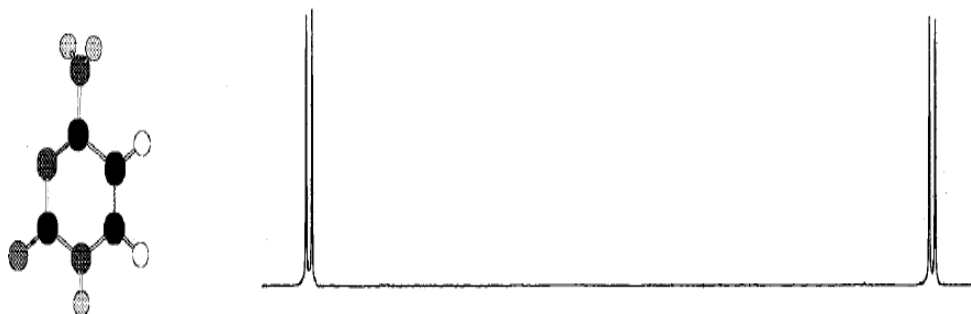
onde $|\epsilon| < 5,5$.

A matriz densidade medida após cada estágio é mostrada graficamente na figura a seguir, sendo a última o resultado da média. Esta técnica, chamada pelos autores de *tomografia de estados quânticos* foi utilizada em vários trabalhos subsequêntes. Para uma implementação de estados pseudo-puros com rotulagem de spin, veja referência [23].

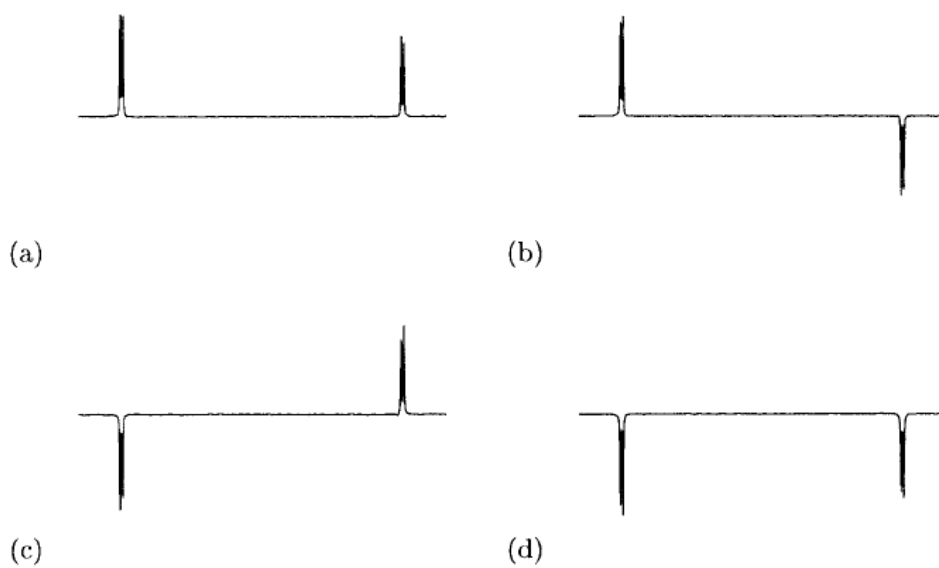


Resultados experimentais de Knill e colaboradores ([22]) de um estado pseudo-puro implementado por médias no clorofórmio.

Cummins e Jones [24] mostram vários exemplos de espectros de estados pseudo-puros populando seletivamente cada um dos estados da base computacional em dois hidrogênios na molécula de citosina.

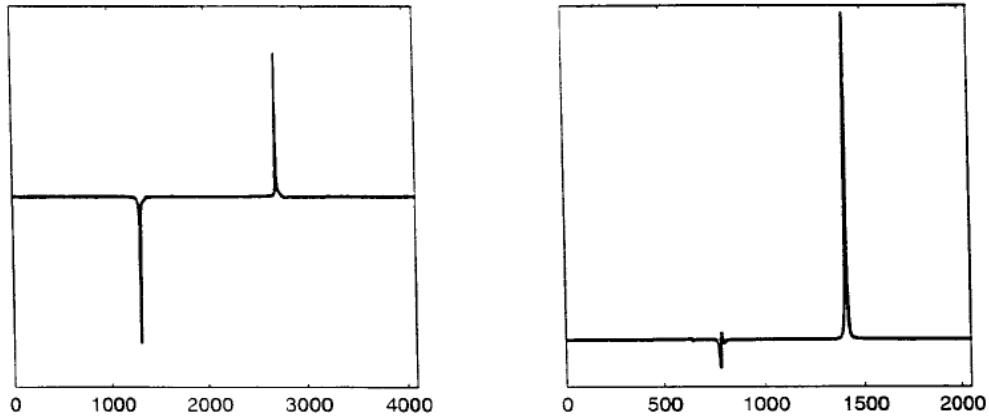


Espectro de equilíbrio da citosina ([24]).



Espectros de estados pseudo-puros na citosina ([24]).

Um belo exemplo de espectro XOR é exibido por Price e colaboradores, reproduzido abaixo. O sistema foi novamente a molécula do clorofórmio. Compare este espectro com aquele calculado na Seção 4.1.



Espectros XOR obtidos por Price e colaboradores ([25]) no clorofórmio.

5.2 Implementação do Algoritmo de Grover

O algoritmo de busca de Grover foi demonstrado experimentalmente por Chuang e colaboradores [26] em um sistema de dois qubits utilizando clorofórmio diluído. As frequências de ressonância do ^1H e ^{13}C medidas foram aproximadamente 125 MHz para o carbono e 500 MHz para o próton. O acoplamento medido foi igual $\hbar\omega^{H-C} = 215$ Hz, e os tempos de relaxação $T_1 = 20$ s e $T_2 = 0,4$ s para o próton, e $T_1 = 21$ s e $T_2 = 0,3$ s para o carbono.

Inicialmente o sistema é colocado em uma superposição uniforme de estados. O estado buscado $|11\rangle$ é rotulado com uma inversão de fase, resultando em:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}[|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle]$$

Em RMN este estado pode ser produzido a partir do estado pseudo-puro em duas etapas: (i) primeiro aplica-se uma transformação de Walsh-Hadamard para produzir a superposição uniforme a partir de $\Delta\rho = |00\rangle\langle 00|$; (ii) aplica-se o operador de inversão de fase

Π , definido pela seqüência de pulsos:

$$\Pi = Y_H \bar{X}_H \bar{Y}_H Y_C \bar{X}_C \bar{Y}_C T^{H-C} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Aqui, na notação dos autores, Y representa um pulso de 90 graus em torno do eixo y e $\bar{Y}$ em torno de $-y$. Os núcleos são identificados no subíndice. Finalmente, T é o operador de evolução na ausência de pulsos, Eq. (32).

A seqüência que executa a busca de Grover para o estado especificado é dada por:

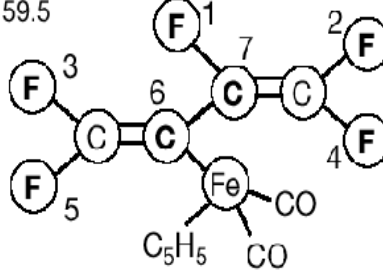
$$U = \bar{X}_H \bar{Y}_H \bar{X}_C \bar{Y}_C T^{H-C} X_H \bar{Y}_H X_C \bar{Y}_C T^{H-C}$$

Os resultados experimentais são comparados com as previsões teóricas medindo-se todos os elementos da matriz densidade. A periodicidade esperada na aplicação do algoritmo além do número “ótimo” de buscas também é demonstrada.

5.3 Implementação do Algoritmo de Shor

O algoritmo de Shor foi implementado recentemente através da RMN por Vandersypen e colaboradores [27]. Eles utilizaram 7 qubits, representados por 5 núcleos de flúor ^{19}F e 2 carbonos ^{13}C , em uma molécula construída com o propósito específico de testar o algoritmo para o caso $N = 15$.

i	$\omega_i/2\pi$	$T_{1,i}$	$T_{2,i}$	J_{7i}	J_{6i}	J_{5i}	J_{4i}	J_{3i}	J_{2i}
1	-22052.0	5.0	1.3	-221.0	37.7	6.6	-114.3	14.5	25.16
2	489.5	13.7	1.8	18.6	-3.9	2.5	79.9	3.9	
3	25088.3	3.0	2.5	1.0	-13.5	41.6	12.9		
4	-4918.7	10.0	1.7	54.1	-5.7	2.1			
5	15186.6	2.8	1.8	19.4	59.5				
6	-4519.1	45.4	2.0	68.9					
7	4244.3	31.6	2.0						



Estrutura da molécula utilizada na demonstração do algoritmo de Shor por RMN [27]. Na tabela, os parâmetros obtidos do espectro de equilíbrio (os parâmetros J representam as interações entre os núcleos).

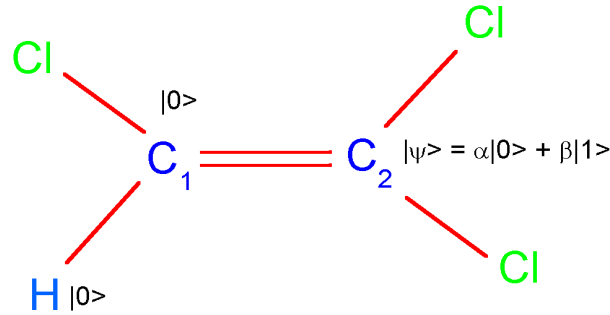
Após a completa caracterização do espectro de equilíbrio, de onde se obtém todas as frequências e tempos de relaxação, os 7 qubits são separados em dois registros $|x\rangle$ e $|y\rangle$ contendo 3 e 4 qubits, respectivamente, e preparados no estado $|000\rangle \otimes |0001\rangle$. Sequências de até 300 pulsos foram construídas para gerar o código do algoritmo nos casos $a = 7$ e $a = 11$. Após a execução do algoritmo, incluindo a aplicação da TFQ, o espectro do registro $|x\rangle$ é medido, de onde se observa uma superposição dos estados $|000\rangle$ e $|100\rangle$, equivalente aos decimais $|0\rangle$ e $|4\rangle$. Tal espectro representa uma leitura direta do período, $r = 4$, do estado quântico. A partir daí, o MDC entre $x^{r/2} \pm 1$ e 15 (realizado classicamente) fornece corretamente os fatores 3 e 5 em ambos os casos.

A maior dificuldade apontada neste caso é a manutenção do estado coerente sob seqüências de pulsos tão longas. Os autores consideraram tais efeitos através de simulações dos espectros. Deve ser enfatizado que a implementação do algoritmo de Shor neste trabalho, corresponde a uma versão “simplificada” pelo fato de N e seus fatores primos serem conhecidos de início (o que possibilita fazer simplificações das representações binárias de a), e pelo fato de que não ter sido utilizado o método de frações contínuas na determinação do período da função f . Com estas simplificações foi possível demonstrar a execução do algoritmo com um sistema contendo 7 qubits, e não 12, como exigido pelo algoritmo na sua forma plena para $N = 15$.

5.4 Implementação da Subrotina de Teleporte

Embora os primeiros experimentos de emaranhamento e teleporte tenham sido realizados com técnicas de óptica, a primeira execução completa em que um estado quântico é teleportado e o resultado final é efetivamente “lido” foi feita por M.A. Nielsen e colaboradores [28] através da técnica de RMN.

O experimento utiliza spins de carbono (^{13}C) e hidrogênio (^1H) da molécula de tricloroetileno, cuja estrutura é mostrada na figura a seguir. Os dois carbonos possuem frequências de RMN ligeiramente diferentes devido às suas vizinhanças químicas distintas. O objetivo do experimento é teleportar o estado do carbono indexado como C_2 para o hidrogênio.



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

Após a completa caracterização do espectro de RMN de equilíbrio, os seguintes parâmetros experimentais são obtidos:

$$\omega^{\text{H}}/2\pi = 500,133491 \text{ MHz}; \quad \omega^{\text{C}^1}/2\pi = 125,772580 \text{ MHz}$$

$$\omega^{\text{C}^2}/2\pi = 125,771669 \text{ MHz}; \quad \omega^{\text{H}^{\text{C}^1}}/2\pi = 0,000201 \text{ MHz}$$

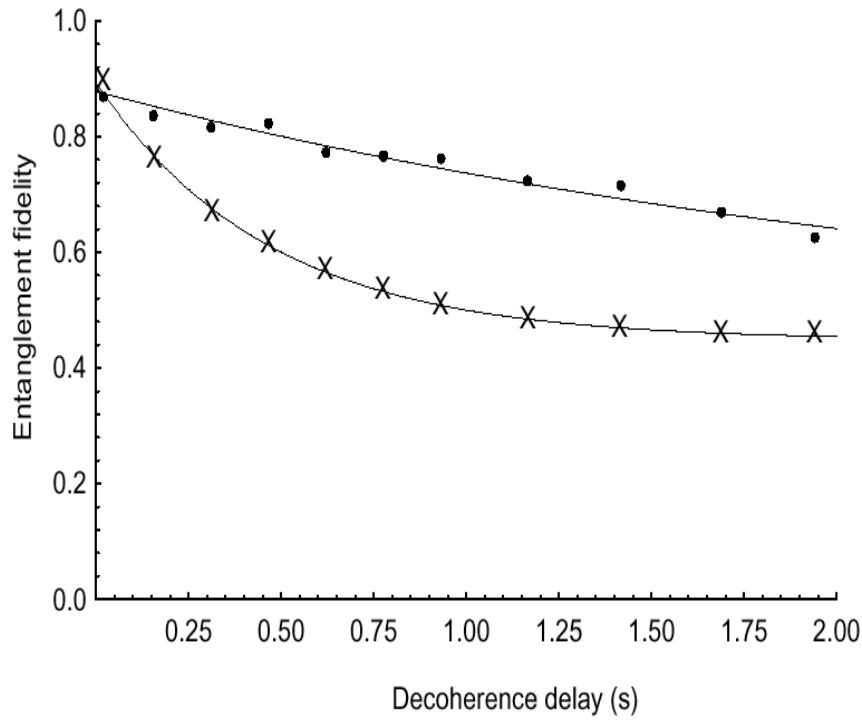
$$\omega^{\text{C}^1\text{C}^2}/2\pi = 0,000103 \text{ MHz}$$

$$T_2(C_1) = 0,4 \text{ s}; \quad T_2(C_2) = 0,3 \text{ s}; \quad T_2(H) = 3 \text{ s}$$

$$T_1(C_1, C_2) \approx 25 \text{ s}; \quad T_1(H) = 5 \text{ s}$$

Os autores utilizam o circuito proposto por Brassard e colaboradores [12], mostrado na Seção 3.1. O estado de entrada no circuito é $|C_2C_1H\rangle = |\psi 00\rangle$, onde $|\psi\rangle$ deve ser teleportado para o H. A operação de emaranhamento é feita sobre C_1 e H, e a medida que ocasiona o colapso da função de onda de H é feita sobre C_1 e C_2 .

Os resultados experimentais, mostrados na figura abaixo, são expressos em termos de uma função chamada de *fidelidade de emaranhamento* (“entanglement fidelity”), que varia entre 0 e 1 [29]. O valor 1 significa “teleporte perfeito”. Classicamente, a transmissão perfeita de informação corresponde a um valor máximo de 0,5. Portanto, qualquer valor acima de 0,5 para a função indica que um processo quântico está ocorrendo. A função é representada contra o *tempo de descoerência*, essencialmente um *atraso* antes que a medida em C_1 e C_2 seja feita, após a operação de emaranhamento. Mostrada ainda na figura, a mesma função obtida após o estágio de emaranhamento, porém sem o processo de teleporte ter sido realizado. A curva superior é obtida de medidas sobre o hidrogênio, e a de baixo sobre o carbono (C_2). O resultado mostra que processos não clássicos estão ocorrendo, o que é interpretado como o teleporte do estado de C_2 para H.



Resultados de Nielsen e colaboradores ([28]) sobre teleporte via RMN do estado de um dos carbonos para o próton no tricloroetileno. A função *entanglement fidelity* é uma medida da qualidade do processo de transferência de informação de um local a outro, e seu valor máximo clássico (transferência perfeita) é 0,5. Qualquer valor acima deste indica a ocorrência de processos não clássicos. A curva inferior representa um experimento de controle.

REFERENCES

- [1] D. Bouwmeester, J.W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter e A. Zeilinger, *Nature* **390** (1997) 575.
- [2] R.P. Feynman, *Found. Phys.*, **16** (1986) 507 e *Opt. News*, Fev. (1985) 11.
- [3] L.K. Grover, *Phys. Rev. Lett.* **79** (1996) 325.
- [4] P.W. Shor, Proc. 35th Ann. Symp. Found. Comp. Sci. (Santa Fe, 1994).
- [5] E.L. Hahn, *Phys. Rev.*, **80** (1950) 580.
- [6] F. Bloch, *Phys. Rev.*, **70** (1946) 460.
- [7] C.P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, 3a. Ed., Springer-Verlag (Berlin, 1990).
- [8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, (Nova York, 1977).
- [9] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Phys.*, Edward Arnold LTD, (Texas, 1980).
- [10] E. Fukushima e S.B.W. Roeder, *Experimental Pulse NMR. A Nuts and Bolts Approach*, Eddison-Wesley (Reading, 1981).
- [11] A. Barenco, C.H. Bennett, R. Cleve, D.P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J.A. Smolin e H. Weinfurter, *Phys. Rev. A*, **52** (1995) 3452.
- [12] G. Brassard, S.L. Braunstein e R. Cleve, *Physica D*, **120** (1998) 43.
- [13] I.L. Chuang, N. Gershenfeld, M.G. Kubinec e D.W. Leung, *Proc. R. Soc. Lond. A* **454** (1998) 447.
- [14] D.G. Cory, A.F. Fahny e T.F. Havel, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **94** (1997) 1634.
- [15] N. Gershenfeld e I.L. Chuang, *Science* **275** (1997) 350.
- [16] A. Einstein, N. Rosen e B. Podolsky, *Phys. Rev.* **47** (1935) 777.

- [17] C.H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres e W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 1895.
- [18] A. Steane, *Rep. Prog. Phys.*, **61** (1998) 117.
- [19] Y.S. Weinstein, M.A. Pravia, E.M. Fortunato, S. Lloyd e D.G. Cory, *Phys. Rev. Lett.*, **86** (2001) 1889.
- [20] A. Lenstra and H. Lenstra, em *Lecture Notes in Mathematics*, v1554 (Springer, Berlin 1993).
- [21] M. Boyer, G. Brassard, P. Hoyer e A. Tapp, quant-ph/9605034; G. Brassard, *Science*, **275** (1997) 627.
- [22] E. Knill, I. Chuang e R. Laflamme, *Phys. Rev. A*, **57** (1998) 3348.
- [23] K. Dorai, Arvind e A. Kumar, *Phys. Rev. A*, **61** (2000) 042306-1.
- [24] H.K. Cummins e J.A. Jones, *Contemp. Phys.*, **41** (2000) 386.
- [25] M.D. Price, S.S. Somaroo, C.H. Tseng, J.C. Gore, A.F. Fahmy, T.F. Havel e D.G. Cory, *J. Mag. Res.*, **140** (1999) 371.
- [26] I.L. Chuang, N. Gershenfeld e M. Kubinec, *Phys. Rev. Lett.*, **80** (1998) 3408.
- [27] L.M.K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C.S. Yannoni, M.H. Sherwood e I.L. Chuang, *Letters to Nature*, **414** (2001) 883.
- [28] M.A. Nielsen, E. Knill e R. Laflamme, *Nature*, **396** (1998) 52.
- [29] B.W. Schumacher, *Phys. Rev. A*, **54** (1996) 2614.