

V Escola do CBPF

Rio de Janeiro, 05 a 09 de julho de 2004

*Introdução à Computação Quântica
via Ressonância Magnética Nuclear (RMN)*

Eduardo Ribeiro de Azevedo, Fábio Aurélio Bonk e Tito José Bonagamba

Introdução à Computação Quântica via Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

1. Introdução

No início de um curso tradicional de Mecânica Quântica estudamos sistemas perfeitamente conhecidos. Para determinar o estado de um sistema em um dado instante é suficiente realizar um conjunto de medidas correspondentes a um conjunto completo de observáveis que comutam entre si. No entanto, o estado do sistema não é frequentemente perfeitamente conhecido. Nestes casos, o problema da Mecânica Quântica é o seguinte: como podemos incorporar ao formalismo a informação incompleta que possuímos sobre o estado do sistema, de modo que as previsões que podemos fazer explorem ao máximo esta informação parcial? Para realizar esta tarefa, necessitamos de uma ferramenta valiosa, o operador densidade $\rho(t)$, que combina a aplicação dos postulados da mecânica quântica com aqueles provenientes da mecânica estatística.

Os tópicos aqui apresentados serão de grande utilidade para a compreensão e desenvolvimento do fenômeno de Ressonância Magnética Nuclear, sendo úteis desde a definição de conceitos básicos, passando pela manipulação adequada dos spins nucleares, e finalizando com a obtenção de sinais de RMN que são muito úteis para o desenvolvimento de portas lógicas e algoritmos utilizados em computação quântica.

2. O Operador Densidade e a RMN

2.1. O conceito de mistura estatística de estados

Quando não dispomos da informação completa sobre um sistema recorreremos ao conceito de probabilidade. Por exemplo, um sistema em equilíbrio termodinâmico a uma temperatura T apresenta uma probabilidade proporcional a $e^{-E_n/kT}$ de se encontrar em um estado de energia E_n . De uma forma mais geral, a informação incompleta de um sistema é descrita em mecânica quântica do seguinte modo: o estado deste sistema pode ser o estado $|\Psi_1\rangle$ com probabilidade p_1 ou o estado $|\Psi_2\rangle$ com probabilidade p_2 , etc... Obviamente:

$$p_1 + p_2 + \dots = \sum_k p_k = 1 \quad (1)$$

Neste caso, dizemos que estamos lidando com uma mistura estatística de estados $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots$ com probabilidades p_1, p_2, \dots . É importante notar que um sistema descrito por uma mistura estatística de estados, com probabilidade p_k de um vetor de estado ser $|\Psi_k\rangle$, não deve ser confundido com um sistema cujo estado $|\Psi\rangle$ é uma superposição linear de estados:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\Psi_k\rangle \quad (2)$$

onde se pode afirmar que o sistema tem probabilidade $|c_k|^2$ de se encontrar no estado $|\Psi_k\rangle$.

2.2. Estado Puro

Para estudar o comportamento de uma mistura estatística de estados já vislumbramos um método: calcular as previsões físicas correspondentes a um possível estado $|\Psi_k\rangle$ e pesar os resultados obtidos pela probabilidade p_k associada a este estado e somar sobre k .

Embora em princípio correto, este método pode nos levar a cálculos muito complicados. De fato, como já discutimos acima, é impossível associar um “vetor estado médio” ao sistema. Na realidade, devemos associar a este sistema um “operador médio” que permita a descrição simplificada de uma mistura estatística de estados: o operador densidade.

2.2.1. Descrição do estado puro através de dos postulados básicos da Mecânica Quântica

Considere um sistema cuja função de onda em um dado instante t é dado por:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle \quad (3)$$

onde o conjunto $\{|u_n\rangle\}$ forma uma base ortonormal de um espaço de estados e os coeficientes $c_n(t)$ satisfazem a relação:

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1 \quad (4)$$

que expressam o fato de que $|\Psi(t)\rangle$ é normalizado.

Logo, se A é um observável, com elementos de matriz:

$$\langle u_n | A | u_p \rangle = A_{np} \quad (5)$$

o valor médio de A em um instante t será:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \sum_{np} c_n^* c_p A_{np} \quad (6)$$

e a evolução de $|\Psi(t)\rangle$ é descrita pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (7)$$

onde $H(t)$ é a Hamiltoniana do sistema.

2.2.2. Descrição do estado puro através do operador densidade

A relação (6) mostra que os coeficientes $c_n(t)$ entram na determinação dos valores médios através de expressões do tipo $c_n^*(t)c_p(t)$. Estes produtos representam simplesmente os elementos de matriz do operador $|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$, o projetor sobre o *ket* $|\Psi(t)\rangle$, como pode ser observado através da equação (3):

$$\langle u_p | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \quad (8)$$

Deste modo, torna-se natural introduzir o operador densidade $\rho(t)$ através da expressão:

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| \quad (9)$$

O operador densidade é representado na base $\{|u_n\rangle\}$ por uma matriz denominada matriz densidade, cujos elementos são:

$$\rho_{pn}(t) = \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \quad (10)$$

Mostraremos agora que a especificação de $\rho(t)$ é suficiente para caracterizar o estado quântico do sistema; ou seja, este operador permite a obtenção de todas as predições físicas que podem ser calculadas conhecendo-se $|\Psi(t)\rangle$. Para realizar esta tarefa, vamos reescrever as expressões (4), (6) e (7) em termos do operador $\rho(t)$. De acordo com a equação (10), a relação (4) indica que a soma dos elementos da diagonal da matriz densidade é igual a 1:

$$\text{Tr} \rho(t) = \sum_n |c_n(t)|^2 = \rho_{nn}(t) = 1 \quad (11)$$

Além disso, usando as equações (5) e (10), a expressão (6) torna-se:

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr} \{ \rho(t) A \} \quad (12)$$

A evolução temporal do operador $\rho(t)$, conhecida como equação de von Neumann, pode ser deduzida a partir da equação de Schrödinger (7):

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \quad (13)$$

E, finalmente, a definição (9) nos permite afirmar que o operador densidade é Hermitiano:

$$\rho^\dagger(t) = \rho(t) \quad (14)$$

2.3. Descrição de uma mistura estatística de estados através do operador densidade

No caso de uma mistura estatística de estados, temos que

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k \quad (15)$$

Deste modo, podemos expressar todas as predições físicas do sistema em termos de ρ , a média de operadores densidade ρ_k , pesados pela probabilidade p_k . Ou seja, ρ é o operador densidade do sistema que envolve uma mistura estatística de estados.

Neste caso, operador densidade segue leis e propriedades semelhantes àquelas mostradas para o caso de um estado puro: $Tr \rho = \sum_k p_k = 1$, $\langle A \rangle = Tr \{ \rho A \}$, ρ é Hermitiano e a evolução temporal do operador densidade que representa uma mistura estatística de estados também é dada pela equação de von Neumann

2.3.1. Populações

Agora surge uma pergunta importante: qual é o significado físico dos elementos de matriz ρ_{nn} de ρ em uma base $\{|u_n\rangle\}$? Analisemos inicialmente os elementos diagonais da matriz ρ_{nn} . De acordo com a equação (15) ($\rho = \sum_k p_k \rho_k$) temos que:

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k [\rho_k]_{nn} \quad (16)$$

Usando (9) ($\rho_k = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$) e introduzindo os componentes

$$c_n^{(k)} = \langle u_n | \Psi_k \rangle \quad (17)$$

de $|\Psi_k\rangle$ na base $\{|u_n\rangle\}$, obtemos:

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k |c_n^{(k)}|^2, \quad (18)$$

onde $|c_n^{(k)}|^2$ é um número positivo, cuja principal interpretação é a seguinte: se o estado do sistema é $|\Psi_k\rangle$, $|c_n^{(k)}|^2$ é a probabilidade de encontrar, em uma medida, o sistema no estado $|u_n\rangle$. De acordo com a equação (16), se levarmos em conta a indeterminância de um estado antes de uma medida, ρ_{nn} representa a probabilidade média de encontrar o sistema no estado $|u_n\rangle$. Por esta razão, ρ_{nn} é denominado população do estado $|u_n\rangle$. Se a mesma medida é repetida N vezes, onde N é um

número grande, $N\rho_{nn}$ sistemas serão encontrados no estado $|u_n\rangle$. É evidente de (18) que ρ_{nn} é um número real positivo, que será igual a zero somente se todos os $|c_n^{(k)}|^2$ forem nulos.

2.3.2. Coerências

Um cálculo análogo ao anterior fornece a seguinte expressão para os elementos não-diagonais da matriz ρ_{np} de ρ :

$$\rho_{np} = \sum_k p_k c_n^{(k)} c_p^{(k)*}, \quad (19)$$

$c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$ expressa os efeitos de interferência entre os estados $|u_n\rangle$ e $|u_p\rangle$, os quais podem surgir quando o estado $|\Psi_k\rangle$ é uma superposição linear de estados. De acordo com a equação (19), ρ_{np} é média destes termos cruzados, tomados sobre todos os possíveis estados de uma mistura estatística. Em contraste com as populações, ρ_{np} pode ser nulo mesmo quando nenhum dos produtos $c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$ se anula, visto que $\sum_k p_k c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$ envolve a soma de números complexos. Se ρ_{np} for nulo, isto significará que a média expressa pela equação (19) terá cancelado quaisquer efeitos de coerência entre estados $|u_n\rangle$ e $|u_p\rangle$. Por outro lado, se ρ_{np} for diferente de zero, uma certa coerência existirá entre estes estados. Esta é a razão pela qual os termos fora da diagonal da matriz ρ_{np} de ρ são denominados por coerências.

Se os *kets* $|u_n\rangle$ são autovetores da Hamiltoniana H , que é assumida ser independente do tempo:

$$H|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle, \quad (20)$$

podemos obter diretamente da equação de von Neumann:

$$\begin{cases} \rho_{nn}(t) = cte \\ \rho_{np}(t) = \rho_{np}(0) e^{i(E_n - E_p)t/\hbar}, \end{cases} \quad (21)$$

Concluindo, as populações são constantes e as coerências oscilam nas frequências de Bohr do sistema.

Sabendo-se $\langle u|\rho|u\rangle \geq 0$, pode-se mostrar a seguinte desigualdade:

$$\rho_{nn}\rho_{pp} \geq |\rho_{np}|^2, \quad (22)$$

de onde pode-se concluir, por exemplo, que ρ possui coerências somente entre estados cujas populações são diferentes de zero.

3. Aplicações gerais do operador densidade em Ressonância Magnética Nuclear

3.1. A evolução temporal do operador densidade

Como já vimos, o operador densidade descreve o estado do sistema, enquanto a Hamiltoniana representa as interações que tentam mudar o estado do sistema. Ambas estão relacionadas através da equação de von Neumann. Se $H(t)$ e $\rho(t)$ comutam entre si, o operador densidade não se altera ao longo do tempo. Caso eles não comutem entre si e H seja independente do tempo ($\partial H/\partial t = 0$), a solução formal da equação de von Neumann é dada por:

$$\rho(t) = e^{iHt} \rho(0) e^{-iHt}, \quad (23)$$

Esta solução pode ser confirmada inserindo a expressão (23) na equação de von Neumann (16) (use a regra do produto para a derivada, sem mudar a ordem dos operadores). O operador:

$$U(t) = e^{-iHt}, \quad (24)$$

o qual “força” o operador densidade a evoluir no tempo de acordo com a equação (23), é denominado propagador.

No caso em que ocorrem evoluções sob Hamiltonianas distintas em intervalos de tempos diferentes, podemos calcular facilmente a evolução temporal do operador $\rho(t)$ da seguinte forma:

$$\rho(t) = e^{iH_n t_n} \dots \left\{ e^{iH_3 t_3} \left[e^{iH_2 t_2} \left(\underbrace{e^{iH_1 t_1} \rho(0) e^{-iH_1 t_1}}_{\text{evento 1}} \right) e^{-iH_2 t_2} \right] e^{-iH_3 t_3} \right\} \dots e^{-iH_n t_n} \quad (25)$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\text{n-ésimo evento}}$

3.2. Sistema em equilíbrio térmico e matrizes

O primeiro exemplo que consideraremos será emprestado da mecânica quântica estatística. Considere um sistema em equilíbrio termodinâmico com um reservatório térmico em uma temperatura absoluta T . Pode-se mostrar que o operador densidade, nestas condições, é dado por:

$$\rho = \frac{e^{-H/kT}}{Z} \quad (26)$$

onde H é o operador Hamiltoniano do sistema, k é a constante de Boltzmann e Z , a função de partição, é o coeficiente de normalização escolhido de tal modo que $Tr\rho = 1$:

$$Z = Tr\{e^{-H/kT}\} \quad (27)$$

Para um dado conjunto de estados $\{|u_n\rangle\}$ de H teremos:

$$\begin{aligned} \rho_{nn} &= \frac{1}{Z} \langle u_n | e^{-H/kT} | u_n \rangle = \\ &= \langle u_n | u_n \rangle \cdot \frac{e^{-E_n/kT}}{Z} = \frac{e^{-E_n/kT}}{Z} \end{aligned} \quad (28)$$

e

$$\begin{aligned} \rho_{np} &= \frac{1}{Z} \langle u_n | e^{-H/kT} | u_p \rangle \\ &= \langle u_n | u_p \rangle = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

Concluindo, no equilíbrio termodinâmico, as populações do estado estacionário são funções exponencialmente decrescentes em função da energia e as coerências entre os estados estacionários são nulas.

Em ressonância magnética nuclear, em campos magnéticos acima de 1 T, a contribuição dominante para a Hamiltoniana de spin é a interação Zeeman:

$$H = -\gamma \hbar I_z B_0 = \hbar \omega_0 I_z. \quad (30)$$

A temperaturas acima de 1 K e em campos magnéticos típicos da ordem de 10 T, o termo que surge no argumento da exponencial da equação (26) ($\rho = e^{-H/kT} / Z$):

$$|H/kT| = |\hbar \omega_0 I_z / kT| \ll 1, \quad (31)$$

de modo que na expansão do operador exponencial da equação (26) os termos quadrático e superiores são desprezíveis quando comparados com o termo linear (“aproximação de alta temperatura”):

$$\rho = e^{-H/kT} / Z \approx \left(\hat{1} + \frac{\hbar \omega_0 I_z}{kT} \right). \quad (32)$$

Como o operador unitário $\hat{1}$ comuta com todos os operadores, consideraremos apenas o operador densidade parcial:

$$\rho \approx \frac{\hbar \omega_0 I_z}{kT} = \alpha I_z. \quad (33)$$

Para facilitar ainda mais nossos cálculos eliminaremos a constante α da expressão (33) e diremos que o operador densidade parcial do estado de equilíbrio será dado apenas por:

$$\rho \approx I_z. \quad (34)$$

Deste modo, para todas as nossas aplicações teremos como situação inicial o estado de equilíbrio:

$$\rho(0) \approx I_z. \quad (35)$$

Para calcularmos a evolução do operador densidade, precisamos inicialmente definir o operador I_z para um dado spin nuclear $(1/2, 1, 3/2, \dots)$, bem como as outras componentes do momento angular I_x e I_y , em termos de matrizes apropriadas.

Para o caso geral de um spin I qualquer, os elementos $(I_j)_{m',m} = \langle m' | I_j | m \rangle$ de uma matriz $(2I+1) \times (2I+1)$ na base dos auto-estados de I_z , $|m\rangle$, podem ser obtidos a partir das relações:

$$\begin{cases} (I_z)_{m',m} = \langle m' | I_z | m \rangle = \langle m' | m | m \rangle = m \delta_{m',m} \\ (I_x + iI_y)_{m',m} = \langle m' | I^\pm | m \rangle = \sqrt{I(I+1) - m(m \pm 1)} \delta_{m',m \pm 1} \\ (I_x)_{m',m} = (\pm iI_y)_{m',m} = \frac{1}{2} \sqrt{I(I+1) - m(m \pm 1)} \delta_{m',m \pm 1} \end{cases} \quad (36)$$

onde a ortonormalidade $\langle m' | m \rangle = \delta_{m',m}$ foi utilizada.

Utilizando-se as expressões (36), podemos obter, por exemplo, as matrizes para o spin 3/2:

$$I_x = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3/4} & 0 & 0 \\ \sqrt{3/4} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3/4} \\ 0 & 0 & \sqrt{3/4} & 0 \end{pmatrix}, I_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3/4} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3/4} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{3/4} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3/4} & 0 \end{pmatrix} e I_z = \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix} \quad (37)$$

3.3. Interação Zeeman, Rotações, Sistema Girante de Coordenadas e Pulsos de radiofrequência

3.3.1. Interação Zeeman

A Hamiltoniana Zeeman de um spin nuclear com momento magnético $\mu = \hbar I$ na presença de um campo magnético estacionário (independente do tempo) $B = B_0 \hat{z}$ é dada pela equação (30) ($H = -\mu \cdot B = -\gamma \hbar I_z B_0$). Podemos analisar o movimento do spin nuclear de acordo com as equações (23) ($\rho(t) = e^{iHt} \rho(0) e^{-iHt}$) e (24) ($U(t) = e^{-iHt}$). O propagador que descreve a evolução do sistema é dado por:

$$U(t) = e^{-iHt} = e^{i\gamma \hbar B_0 I_z t} = e^{i\hbar \omega_0 I_z t} \quad (38)$$

A matriz densidade em um instante t é, de acordo com a equação (23):

$$\rho(t) = e^{-i\hbar \omega_0 I_z t} \rho(0) e^{i\hbar \omega_0 I_z t} = e^{-i\hbar \omega_0 I_z t} I_z e^{i\hbar \omega_0 I_z t} \quad (39)$$

Como estamos interessados na evolução da magnetização, a qual é proporcional ao momento angular I , calcularemos os valores esperados de I_z , I_x e I_y em função do tempo. $\langle I_z \rangle(t)$ é dado por:

$$\begin{aligned}\langle I_z \rangle(t) &= Tr\{I_z(t)\rho(0)\} = Tr\{e^{-ih\omega_0 I_z t} I_z e^{ih\omega_0 I_z t} \rho(0)\} \\ &= Tr\{I_z \rho(0)\} = \langle I_z \rangle(0)\end{aligned}\quad (40)$$

ou seja, a componente I_z do momento angular é independente do tempo.

Ao invés de calcularmos separadamente os valores esperados de I_x e I_y , calcularemos o valor esperado do operador $I_+ = I_x + iI_y$:

$$\langle I_+ \rangle(t) = Tr\{I_+(t)\rho(0)\} = Tr\{e^{-ih\omega_0 I_z t} I_+ e^{ih\omega_0 I_z t} \rho(0)\} \quad (41)$$

Primeiro temos que provar que

$$e^{-ih\omega_0 I_z t} I_+ e^{ih\omega_0 I_z t} = e^{i\omega_0 t} I_+ \quad (42)$$

ou, de uma forma mais genérica que:

$$e^{-i\phi I_z} I_+ e^{i\phi I_z} = e^{i\phi} I_+ . \quad (43)$$

Partindo da expressão (24) temos:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}U &= -iHU = -i\omega_0 I_z U \\ \frac{d}{dt}U^\dagger &= -iHU^\dagger = i\omega_0 U^\dagger I_z\end{aligned}\quad (44)$$

e

$$\frac{d}{dt}U^\dagger I_+ U = i\omega U^\dagger I_+ U . \quad (45)$$

Integrando a expressão final da equação (45) obtemos as equações (42) e (43). Tomando os Hermitianos conjugados de ambos os lados da equação (43), obtemos:

$$e^{i\phi I_z} I_- e^{-i\phi I_z} = e^{-i\phi} I_- . \quad (46)$$

Substituindo a propriedade (42) na expressão (41):

$$\begin{aligned}\langle I_+ \rangle(t) &= e^{i\omega_0 t} \langle I_+ \rangle(0) \\ \langle I_- \rangle(t) &= e^{-i\omega_0 t} \langle I_- \rangle(0) ,\end{aligned}\quad (47)$$

ou separando as partes real e imaginária:

$$\begin{aligned}\langle I_x \rangle(t) &= \langle I_x \rangle(0) \cos(\omega_0 t) - \langle I_y \rangle(0) \sin(\omega_0 t) \\ \langle I_y \rangle(t) &= \langle I_x \rangle(0) \sin(\omega_0 t) + \langle I_y \rangle(0) \cos(\omega_0 t) ,\end{aligned}\quad (48)$$

Estas variações correspondem a rotações em torno do campo magnético aplicado ao longo da direção z , ou seja, o valor esperado do vetor momento angular executa um movimento de

precessão em torno do campo magnético aplicado com frequência dada por $\omega_0 = \gamma B_0$, conhecida como frequência de Larmor. Outra forma de expressar este importante resultado é através da equação de precessão de Larmor para o valor esperado do operador momento angular $\langle I \rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle I \rangle = -(\gamma B_0 \hat{z}) \wedge \langle I \rangle = -(\omega_0) \wedge \langle I \rangle, \quad (49)$$

Considerando que o momento magnético do spin nuclear é dado por:

$$\mu = \gamma \hbar I, \quad (50)$$

e que para um número muito grande de núcleos idênticos a magnetização total é dada por

$$M = \sum_i \langle \mu_i \rangle, \quad (51)$$

a equação de precessão é válida também para estas duas grandezas:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \mu \rangle &= -(\omega_0) \wedge \langle \mu \rangle \\ \frac{d}{dt}M &= -(\omega_0) \wedge M \end{aligned} \quad (52).$$

Estas equações de precessão obtidas quanticamente correspondem ao movimento clássico esperado para estas grandezas físicas, fato que facilita a compreensão do fenômeno de ressonância magnética nuclear.

3.3.2. Sistema girante de coordenadas

Como já vimos no item anterior, para a interação Zeeman a expressão obtida para a evolução do operador densidade é dada por:

$$\rho(t) = e^{-i\omega_0 t I_z} I_\alpha e^{i\omega_0 t I_z}, \quad I_\alpha = I_x, I_y \text{ ou } I_z, \quad (53)$$

que representa a rotação do operador I_α de um ângulo $\omega_0 t$ em torno do eixo z , ou, em outras palavras, a precessão do operador I em torno do campo $B_0 \hat{z}$ com frequência ω_0 .

O efeito desta precessão é geralmente eliminada através da mudança apropriada do sistema de referência fixo para um sistema de referência que gira em torno do eixo z com frequência $\omega_R \approx \omega_0$. Tal sistema de referência é denominado sistema girante de coordenadas, que corresponde ao referencial onde a precessão Zeeman é “eliminada”.

Formalmente, o operador densidade visto pelo referencial girante pode ser escrito como:

$$\rho_R(t) = e^{i\omega_R t I_z} \rho(t) e^{-i\omega_R t I_z} = e^{i\omega_R t I_z} \left(e^{-i\omega_0 t I_z} I_\alpha e^{i\omega_0 t I_z} \right) e^{-i\omega_R t I_z} = e^{i(\omega_R - \omega_0) t I_z} I_\alpha e^{-i(\omega_R - \omega_0) t I_z}, \quad (54)$$

e, considerando o caso “ideal” $\omega_R = \omega_0$:

$$\rho_R(t) = I_\alpha. \quad (55)$$

De agora em diante utilizaremos este referencial para analisar todas as outras interações dos spins nucleares com os campos magnéticos ou elétricos que eles sofrem interna ou externamente à amostra.

3.3.3. Efeitos dos campos de radiofrequência sobre os spins nucleares

Em ressonância magnética nuclear, além do campo magnético estacionário aplicado ao longo da direção \hat{z} , aplica-se ao sistema de spins nucleares um segundo campo magnético $B_1 \ll B_0$, com amplitude da ordem de 10 Gauss, que oscila no plano xy com a frequência de Larmor $\omega_{RF} \approx \gamma B_0$. Em campos magnéticos típicos usados em RMN (1-10 T), a frequência de Larmor é da ordem de 10-100 MHz. Estas frequências encontram-se na faixa de ondas de rádio e, por esta razão, denominamos este segundo campo magnético de campo de radiofrequência ou, simplesmente, de campo de RF. Sendo uma perturbação dependente do tempo com energia igual à separação entre níveis adjacentes de energia referentes à interação Zeeman, ela será responsável pela excitação dos spins nucleares. Como estes campos oscilantes são aplicados com frequência igual à frequência do sistema girante de coordenadas, eles serão vistos como estacionários neste referencial.

Os campos de RF são normalmente aplicados com duração bem definida, na forma de pulsos. Por esta razão dizemos que aplicamos pulsos de RF ao sistema de spins. Vejamos agora com mais detalhes os efeitos destes pulsos do ponto de vista do operador densidade no sistema girante de coordenadas.

De um modo simplificado podemos expressar o campo de RF na forma:

$$B_1(t) = B_1 \cos(\omega_{RF}t + \phi). \quad (56)$$

A fase ϕ indicará a direção do campo de RF ao longo do plano xy do sistema girante de coordenadas. Por exemplo, para $\phi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ e 270° teremos, respectivamente, as seguintes orientações escolhidas arbitrariamente para B_1 : $x, y, -x$, e $-y$. Esta possibilidade de aplicar os pulsos de RF com orientações distintas é de fundamental importância em RMN para a manipulação adequada dos spins.

Logo, a Hamiltoniana que descreve o efeito do campo de RF no sistema girante de coordenadas é então dada por:

$$H_{RF} = -\gamma \hbar I_\alpha B_{1\alpha}, \quad (57)$$

Onde $\alpha = x, y, -x$, e $-y$ define a orientação de B_1 . Utilizando-se a forma genérica da expressão (43):

$$e^{-i(\gamma B_{1\alpha})I_\alpha t} e^{i(\gamma B_{1\alpha})I_\alpha t} = e^{i\gamma B_{1\alpha} t} I_\alpha = e^{i\beta_\alpha} I_\alpha, \quad (58)$$

temos que a aplicação de um pulso de RF resulta na rotação da componente do operador momento angular I_α em torno do campo de RF $B_{1\alpha}$ de um ângulo $\beta_\alpha = \gamma B_{1\alpha} t$, onde t corresponde a duração do pulso de RF. Por exemplo, se um pulso de RF é aplicado com o campo de RF ao longo da direção x do sistema girante de coordenadas, B_{1x} , durante um intervalo de tempo t , de modo que $\beta_x = \gamma B_{1x} t = \pi/2$, sobre o operador densidade $\rho(0) = I_z$, teremos como resultado uma rotação de $\pi/2$ para I_z em torno do eixo x , levando-o para a direção y , segundo a regra da mão esquerda. Ou seja:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= e^{-i\hbar(\gamma B_{1x})I_x t} I_z e^{i\hbar(\gamma B_{1x})I_x t} = e^{i\gamma B_{1x} t} I_z = e^{i(\pi/2)_x} I_z, \\ &= I_z \cos(\pi/2) + I_y \text{sen}(\pi/2) = I_y, \end{aligned} \quad (59)$$

Se duplicarmos a duração do pulso ou a intensidade do campo B_1 teremos $\beta_x = \gamma B_{1x} t = \pi$, resultando na inversão do spin.

Podemos generalizar estes resultados dizendo que no sistema girante de coordenadas o efeito da aplicação dos pulsos de RF sobre o sistema de spins pode ser representado por matrizes de rotação em torno do eixos x , y , $-x$ e $-y$ ou em torno de um eixo oblíquo qualquer. Os efeitos de campos locais na direção z , por exemplo interação Zeeman, também pode ser descritos como rotações em torno deste eixo.

3.3.4. O sinal de RMN sob Interação Zeeman

Após um pulso de RF de $\pi/2$, o operador I_y evoluirá apenas sob a ação do campo magnético estacionário B_0 , e, no sistema fixo de coordenadas, teremos:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= e^{-i(\gamma B_0)I_z t} I_y e^{i(\gamma B_0)I_z t} = e^{i\gamma B_0 t} I_y, \\ &= I_y \cos(\omega_0 t) + I_x \text{sen}(\omega_0 t), \end{aligned} \quad (60)$$

Este resultado indica que o operador momento angular estará executando um movimento de precessão com a freqüência de Larmor em torno do campo B_0 e contido no plano xy .

Considerando que o momento magnético do spin nuclear é dado pela equação (50) ($\mu = \gamma \hbar I$) e que para um número muito grande de partículas núcleos idênticos a magnetização total é dada pela equação (51) ($M = \sum_i \langle \mu_i \rangle$), podemos estender o resultado da equação (60) para a magnetização transversal esperada, dizendo que ela executa também o mesmo movimento de precessão:

$$\langle M_{xy}(t) \rangle = \langle M_y \rangle \cos(\omega_0 t) + \langle M_x \rangle \text{sen}(\omega_0 t), \quad (61)$$

A mesma bobina que gera o campo de RF é utilizada para detectar o sinal de RMN, o qual resulta da precessão descrita na equação (61). Esta precessão da magnetização gera uma variação de fluxo de campo magnético no interior da bobina, o qual, pela Lei de Faraday-Lenz, resulta na

geração de uma força-eletromotriz. Esta tensão alternada que oscila na frequência de Larmor é chamada de “sinal-de-indução-livre” ou, em inglês, “free-induction-decay”, termo que define a denominação do sinal de RMN pela sigla FID.

3.3.5. Interação Quadrupolar Elétrica (spin 3/2)

A interação quadrupolar já foi discutida anteriormente e sua Hamiltoniana é dada por:

$$H_Q = \frac{1}{6} \omega_Q [3I_z^2 - I(I+1)\hat{1}] = \frac{1}{6} \omega_Q \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad (62)$$

Após um pulso de RF de $\pi/2$ não-seletivo, que excita todas as transições simultaneamente, na direção y sobre I_z , o operador I_x evoluirá apenas sob a ação das interações Zeeman e quadrupolar. No sistema girante de coordenadas, teremos:

$$\rho(t) = e^{-i\omega_Q t} I_x e^{i\omega_Q t} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3/4} e^{-i\omega_Q t} & 0 & 0 \\ \sqrt{3/4} e^{i\omega_Q t} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3/4} e^{i\omega_Q t} \\ 0 & 0 & \sqrt{3/4} e^{-i\omega_Q t} & 0 \end{bmatrix}, \quad (63)$$

Logo, podemos, por exemplo, determinar a evolução do operador $I_x + iI_y$ em função do tempo calculando o seu valor esperado:

$$\langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle = Tr[\rho(t)(I_x + iI_y)] = 3 \cos(\omega_Q t) + 2 \cos(0t). \quad (64)$$

A equação (64) representa, de forma simplificada, o sinal FID adquirido, cuja composição espectral corresponde a duas linhas centradas em $-\omega_Q$ (transição 23) e $+\omega_Q$ (transição 01) com amplitudes 3/4 e outra posicionada na frequência zero (transição 12) com amplitude 1.

No caso de pulsos não-seletivos com $\theta < \pi/2$, obteremos uma menor projeção de I_z no eixo y , porém o mesmo espectro será observado, agora com intensidade dada por $\langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle = [3 \cos(\omega_Q t) + 2 \cos(0t)] \sin \theta$. De um modo geral, os pulsos não-seletivos são representados nas diferentes direções por: $P_x = e^{iI_x \theta}$, $P_y = e^{iI_y \theta}$, $P_{-x} = e^{-iI_x \theta}$ e $P_{-y} = e^{-iI_y \theta}$.

É possível também, excitar apenas uma transição do espectro quadrupolar. Para esta finalidade podemos aplicar os pulsos seletivos de RF utilizando apresentadas na equação 65:

$$P_\alpha^{01}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right) e^{2i\omega_Q t_p} & i \operatorname{sen}\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right) e^{-i\left(2\omega_Q t_p + \frac{\pi}{2}\alpha\right)} & 0 & 0 \\ i \operatorname{sen}\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right) e^{-i\left(2\omega_Q t_p - \frac{\pi}{2}\alpha\right)} & \cos\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right) e^{2i\omega_Q t_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i4\omega_Q t_p} \end{pmatrix} \quad (65a)$$

$$P_{\alpha}^{12}(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_q t_p} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{i\omega_q t_p} & isen\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{-i\left(\omega_q t_p + \frac{\pi}{2}\alpha\right)} & 0 \\ 0 & isen\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{-i\left(\omega_q t_p - \frac{\pi}{2}\alpha\right)} & \cos\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{i\omega_q t_p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\omega_q t_p} \end{pmatrix}, \quad (65b)$$

$$P_{\alpha}^{23}(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-2i\omega_q t_p} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{2i\omega_q t_p} & isen\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{-i\left(2\omega_q t_p + \frac{\pi}{2}\alpha\right)} \\ 0 & 0 & isen\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{-i\left(2\omega_q t_p - \frac{\pi}{2}\alpha\right)} & \cos\left(\frac{\sqrt{3}\theta}{2}\right)e^{2i\omega_q t_p} \end{pmatrix} \quad (65c)$$

onde o parâmetro α pode assumir os seguintes valores: 0 quando o pulso seletivo é aplicado na direção x e 1 quando o pulso é aplicado na direção y .

Por exemplo, após a aplicação dos pulsos seletivos de $\pi/2$ P_y^{01} , P_y^{12} e P_y^{23} sobre o estado de equilíbrio, podemos determinar a evolução do operador $I_x + iI_y$ em função do tempo calculando o seu valor esperado. Obtemos então os respectivos sinais de RMN, apresentados na equação 66. Cada um destes sinais corresponde às transições específicas em $+\omega_Q$ (transição 01), 0 (transição 12) e $-\omega_Q$ (transição 23) com amplitudes $\sqrt{3/4}$, 1 e $\sqrt{3/4}$, respectivamente.

$$\begin{aligned} P_y^{01} &\Rightarrow \langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle = Tr[\rho(t)(I_x + iI_y)] = \sqrt{3/4}e^{+i\omega_Q t} \\ P_y^{12} &\Rightarrow \langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle = Tr[\rho(t)(I_x + iI_y)] = 1 \\ P_y^{23} &\Rightarrow \langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle = Tr[\rho(t)(I_x + iI_y)] = \sqrt{3/4}e^{-i\omega_Q t} \end{aligned} \quad (66)$$

3.3.6. Considerações sobre o sinal de RMN após um pulso de $\pi/20$ e a matriz densidade inicial.

No tratamento anterior fica claro que o espectro de RMN, obtido após a aplicação de um pulso de $\pi/2$ e a leitura do sinal, depende não somente da interação de spin nuclear, mas também do estado do sistema de spins antes da aplicação deste pulso. De fato, esta é uma característica fundamental para a utilização da RMN em Computação quântica, já que neste caso é fundamental que se execute a leitura do estado de saída do sistema. Sendo assim, através do espectro de RMN obtido após um pulso $\pi/2$ é possível inferir características do estado inicial do sistema embora, não seja possível caracterizá-lo completamente somente através de seu espectro característico. A impossibilidade de caracterizar completamente o estado do sistema se deve ao fato do espectro de RMN não representar completamente a matriz densidade original. De fato, se usarmos um esquema de leitura onde a fase de um pulso de $\pi/20$ é mudada de x , y , $-x$ e $-y$ em aquisições sucessivas, é possível mostrar que os elementos diagonais da matriz densidade inicial, ρ_{ij} , são relacionados com

as amplitudes do espectro final, A_{01} , A_{12} , A_{23} , e com os elementos de matriz e_{ij} através da seguinte relação:

$$\begin{aligned}
 A_{01} &= \sqrt{3}(e_{11}e_{12}\rho_{11} - e_{12}e_{22}\rho_{22} - e_{23}e_{13}\rho_{33} - e_{13}e_{14}\rho_{44}) \\
 A_{12} &= 2(e_{13}e_{12}\rho_{11} + e_{22}e_{23}\rho_{22} - e_{23}e_{22}\rho_{33} - e_{13}e_{12}\rho_{44}) \\
 A_{23} &= \sqrt{3}(e_{13}e_{14}\rho_{11} + e_{13}e_{23}\rho_{22} + e_{12}e_{22}\rho_{33} - e_{11}e_{12}\rho_{44}) \\
 \rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} + \rho_{44} &= 0
 \end{aligned} \tag{67}$$

Portanto, conhecendo-se as amplitudes de cada linha do espectro, é possível obter os elementos diagonais da matriz densidade imediatamente antes do pulso de leitura. É importante lembrar que estamos denotando por ρ a matriz densidade parcial (equação 33), ou seja, somente parte da matriz densidade que é afetada pelos pulsos de RF e pode ser detectada. Por esta razão o traço da matriz densidade é nulo e não unitário (última expressão da equação 67) como o seria para a matriz densidade total.

4. Computação Quântica via RMN

Em computação clássica, basicamente todo o tratamento da informação é processado nos transistores, que através de suas junções semicondutoras, permitem associar valores lógicos “sim” ou “não”, ou melhor, valores 0 ou 1, à tensão de saída: os chamados **bits**. A idéia básica da denominada computação quântica (CQ) é utilizar como base computacional os estados de um sistema físico microscópico, isto é, o estado lógico passa a ser representado de acordo com o estado do sistema físico. Nestes casos, a unidade lógica quântica (denominada **qubit**, do inglês *quantum bit*) é utilizada no tratamento da informação. A principal diferença de um *qubit* e o *bit* é que os *qubits* podem ocorrer em forma de **superposição**, isto é, podem existir estados quânticos que representam simultaneamente tanto o “sim” como o “não” da computação clássica. Isto torna a base computacional imensamente maior, pois uma série de operações podem ser executadas quase que simultaneamente, isto é, o paralelismo do sistema é aumentado.

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) tornou-se ao longo dos anos uma das ferramentas experimentais mais importantes empregadas no estudo e caracterização da dinâmica e estrutura de materiais no estado sólido ou em solução, bem como em aplicações médicas. Isto se deve aos formidáveis avanços da técnica deste a descoberta do fenômeno nos anos 50. Grande parte desses avanços ocorreram devido ao desenvolvimento de métodos que permitiram a manipulação dos momentos magnéticos nucleares associados aos spins nucleares através da aplicação de pulsos de radiofrequência com fases e amplitudes adequadamente escolhidas. Mais recentemente, a técnica também vem sendo utilizada com sucesso para a implementação em métodos computacionais, sejam eles clássicos ou quânticos. De fato, desde a demonstração, por Chuang *et al.*, de que a RMN poderia ser utilizada como um método experimental para a implementação de algoritmos quânticos,

vários trabalhos envolvendo a implementação desses algoritmos utilizando a RMN foram realizados. Algoritmos complexos como o de busca de Grover e fatoração de Shor foram adequadamente demonstrados utilizando a RMN. Em RMN, o número de *qubits* do sistema é determinado pelo spin nuclear total do sistema, de modo que o número de *qubits* (N) é dado por $(2I+1) = 2^N$. O grande avanço na área só foi possível devido ao fato, já mencionado, dos momentos magnéticos nucleares poderem ser facilmente manipulados através dos pulsos de radiofrequência. Além disso, os spins nucleares são bem isolados do seu “meio ambiente” local, o que implica na manutenção da coerência dos estados quânticos por relativamente longos intervalos de tempo (*ms - s*). No entanto, existem também algumas desvantagens na utilização da RMN. Por exemplo: a) O número de *qubits* (ocorrendo em sistemas naturais) é limitado. O máximo conseguido até hoje foi um sistema de 7 *qubits*. b) A utilização de um grande número de spins para produzir o sinal de RMN reduz drasticamente a eficiência da computação e a detecção do sinal, principalmente quando se aumenta o número de *qubits*. Mais recentemente, muitas implementações de operações quânticas têm sido realizadas utilizando-se núcleos com spin nuclear maior que $\frac{1}{2}$ (chamados no jargão de RMN de núcleos quadrupolares). Neste caso, os bits lógicos são associados aos níveis de energia discretos, resultantes da interação dos spins nucleares com o campo magnético externo intenso utilizado no experimento de RMN e com o gradiente de campo elétrico na vizinhança dos núcleos. Átomos com núcleos quadrupolares como ^7Li , ^{23}Na e ^{133}Cs diluídos em matrizes líquido cristalinas produzem espectros de RMN que representam exatamente as frequências de transição entre os níveis adjacentes. Deste que foi demonstrado, por Fung *et al.*, que era possível gerar os estados da base computacional nestes sistemas, surgiram vários trabalhos envolvendo a implementação de portas lógicas e algoritmos, bem como estudos sobre propriedades básicas do sistema, como por exemplo, a perda de informação devido à descoerência. De agora em diante serão discutidos alguns dos principais aspectos do uso da ressonância magnética nuclear como ferramenta para a computação quântica. Em particular, discutiremos a implementação de portas lógicas fundamentais para a execução de algoritmos, utilizando-se como sistema de spins núcleos quadrupolares de átomos de ^{23}Na ($I = 3/2$) diluídos em uma matriz líquido cristalina. Neste caso, o número de *qubits* será dado por $(2I+1) = 2^N$, ou seja $N = 2$ *qubits*.

Em computação quântica a implementação de uma operação lógica significa a ação do operador que representa a mesma em um dos estados do sistema, de modo a levar o sistema a um estado de saída de acordo com a lógica da operação. Em outras palavras, a implementação de uma operação lógica possui etapas bem definidas que são: a) Preparação do estado físico que corresponderá ao estado de entrada, b) Implementação das rotações unitárias que executam as operações lógicas e c) Leitura do estado do sistema.

As etapas a) e c) são gerais, isto é, são realizadas para qualquer operação lógica, sendo que a maneira com que são implementadas depende do sistema físico e da metodologia utilizada. Vamos então discutir cada um desses passos do ponto de vista da RMN, começando pela leitura do estado do sistema, seguido da preparação dos estados iniciais e, finalmente, a implementação de algumas operações lógicas.

3.4.1 Leitura do Estado Quântico de um Sistema de Spins (Tomografia da Matriz Densidade)

Na seção anterior foi dito que a aplicação de um pulso de leitura de $\pi/20$ e a correta do sinal, permitem que se possa obter os elementos diagonais da matriz densidade parcial, a qual denominaremos por $\Delta\rho$ daqui em diante. No entanto, para a caracterização completa do estado do sistema é necessário obter toda a matriz densidade. O procedimento que permite que a matriz densidade de um sistema seja determinada a partir de dados experimentais, que em nosso caso são os espectros de RMN, é denominado *tomografia da matriz densidade*. Nesta seção apresentaremos um método particular para tomografar a matriz densidade de um sistema de núcleos quadrupolares com $I=3/2$, porém os métodos para outros spins nucleares usam a mesma idéia. Consideremos então uma matriz densidade geral, que se deseja tomografar:

$$\Delta\rho = \begin{bmatrix} a & x_a + iy_a & x_b + iy_b & x_c + iy_c \\ x_a - iy_a & b & x_d + iy_d & x_e + iy_e \\ x_b - iy_b & x_d - iy_d & c & x_f + iy_f \\ x_c - iy_c & x_e - iy_e & x_f - iy_f & d \end{bmatrix} \quad (68)$$

Como os elementos diagonais são diretamente obtidos à partir do método descrito na seção anterior, para obter os demais elementos basta, á princípio, encontrar um conjunto de operações (executadas pelos pulsos de RF) que leve seletivamente um elemento não diagonal para a diagonal e em então repetir o processo de leitura. Como exemplo, consideremos a diagonal da matriz densidade parcial obtida após a ação de um pulso de $\pi/2$ seletivo na transição 01 na matriz parcial acima.

$$\Delta\rho(P_X^{01}) = P_X^{01} \left(\frac{\pi}{2}\right) \cdot \Delta\rho \cdot \left(P_X^{01} \left(\frac{\pi}{2}\right)\right)' = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a + y_a + b & & & \\ & a - 2y_a + b & & \\ & & 2c & \\ & & & 2d \end{bmatrix} \quad (69)$$

O resultado é que a diagonal da nova matriz densidade parcial depende do elemento y_a da matriz anterior, que pode então ser determinado repetindo-se o processo de leitura. Repetindo-se o processo com outros pulsos é possível obter outro elemento e assim por diante. De fato, é possível fazer um equacionamento geral que permita relacionar todos os elementos da matriz densidade

parcial com os elementos diagonais das matriz densidade parcial criada por um sequência de pulsos específicas. O resultado obtido é:

$$\begin{aligned}
y_a &= [\Delta\rho_{11}(P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{22}(P_{01}^x(\frac{\pi}{2}))] / 2 \\
y_d &= [\Delta\rho_{22}(P_{12}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{33}(P_{12}^x(\frac{\pi}{2}))] / 2 \\
y_f &= [\Delta\rho_{33}(P_{23}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{44}(P_{23}^x(\frac{\pi}{2}))] / 2 \\
x_a &= [\Delta\rho_{11}(P_{01}^y(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{22}(P_{01}^y(\frac{\pi}{2}))] / 2 \\
x_d &= [\Delta\rho_{22}(P_{12}^y(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{33}(P_{12}^y(\frac{\pi}{2}))] / 2 \\
x_f &= [\Delta\rho_{33}(P_{23}^y(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{44}(P_{23}^y(\frac{\pi}{2}))] / 2 \\
x_b &= [\Delta\rho_{22}(P_{12}^x(\frac{\pi}{2})P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{33}(P_{12}^x(\frac{\pi}{2})P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) - \sqrt{2}y_d] / \sqrt{2} \\
y_b &= [\Delta\rho_{33}(P_{12}^y(\frac{\pi}{2})P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{22}(P_{12}^y(\frac{\pi}{2})P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) + \sqrt{2}x_d] / \sqrt{2} \\
x_e &= [\Delta\rho_{33}(P_{23}^x(\frac{\pi}{2})P_{12}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{44}(P_{23}^x(\frac{\pi}{2})P_{12}^x(\frac{\pi}{2})) - \sqrt{2}y_f] / \sqrt{2} \\
y_e &= [\Delta\rho_{44}(P_{23}^y(\frac{\pi}{2})P_{12}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{33}(P_{23}^y(\frac{\pi}{2})P_{12}^x(\frac{\pi}{2})) + \sqrt{2}x_f] / \sqrt{2} \\
x_c &= \Delta\rho_{33}(P_{23}^y(\frac{\pi}{2})P_{12}^y(\frac{\pi}{2})P_{01}^y(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{44}(P_{23}^y(\frac{\pi}{2})P_{12}^y(\frac{\pi}{2})P_{01}^y(\frac{\pi}{2})) - \sqrt{2}x_f + x_e \\
y_c &= \Delta\rho_{44}(P_{23}^x(\frac{\pi}{2})P_{12}^x(\frac{\pi}{2})P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) - \Delta\rho_{33}(P_{23}^x(\frac{\pi}{2})P_{12}^x(\frac{\pi}{2})P_{01}^x(\frac{\pi}{2})) + \sqrt{2}y_f + x_e
\end{aligned} \tag{70}$$

Portanto, utilizando sucessivos pulsos seletivos e procedimentos de leitura é possível executar uma tomografia completa de qualquer matriz densidade parcial.

3.4.2 Criação dos Estados da Base Computacional para RMN

Nos itens anteriores foi discutido que o sistema de spins nucleares utilizado em RMN encontra-se em equilíbrio térmico, o que em outras palavras significa que o operador densidade do sistema encontra-se em uma mistura estatística de estados. Essa característica leva, à princípio, a um impasse para a utilização da RMN em computação quântica, já que uma das prerrogativas de se utilizar um sistema quântico para computação é que o estado em que o sistema se encontra seja bem definido, isto é, ele deve a princípio ser um estado puro. De fato, utilizar uma mistura estatística para realizar uma operação lógica significa não saber exatamente qual o estado inicial do sistema (antes de se executar a operação lógica) e, conseqüentemente, também não saber o estado final. Este foi um problema fundamental para a utilização da RMN como técnica para a implementação de operações quânticas, já que logo foi reconhecido que a facilidade e controle que a metodologia possui para manipular os momentos magnéticos nucleares a tornariam uma candidata natural, mas a indeterminação do estado do sistema impediria a sua aplicação. Felizmente, foi exatamente a facilidade na manipulação dos momentos magnéticos que levou Cory *et al.* e paralelamente Chuang, Gershenfeld e Kubineck a propor um método que contornaria esse problema. A idéia básica das proposições feitas pelos autores é utilizar os pulsos de radiofrequência para manipular as

populações e coerências quânticas do sistema de spins para fazer com que ele seja levado a um estado que seja “efetivamente” puro, os chamados estados pseudo-puros. Sendo assim, para se fazer qualquer operação lógica utilizando RMN é necessário preparar o sistema em um dos possíveis estados pseudo-puros. Para ilustrar isso de forma mais clara, consideremos o estado inicial de equilíbrio térmico no limite de altas temperaturas, que pode ser representado pelo seguinte operador densidade.

$$\rho_{eq} = \frac{1}{Z} + \frac{1}{Z} \frac{H}{k_B T} = \frac{1}{Z} + \frac{1}{k_B T} \Delta\rho_{eq} \quad (71)$$

Lembremos novamente, que operações unitárias, U , só afetam a segunda parte do operador, mantendo a primeira invariante. Em outras palavras, se aplicarmos um conjunto de pulsos de RF, que implementam essas operações unitárias, eles só afetarão o operador densidade parcial, $\Delta\hat{\rho}$. Assim sendo, se for possível descobrir uma seqüência de pulsos que faça o operador de desvio igual a um operador de estado puro, teremos criado um estado puro efetivo, e a partir daí outras operações, que podem ser usadas para implementar operações lógicas, só atuarão neste estado. É importante recordar também que, como já discutido anteriormente, que o sinal detectado em RMN provém somente do operador de desvio e, como consequência, o primeiro termo do operador densidade é invariante sob rotações. Essas duas características permitem a observação da evolução de estados pseudo-puros em um *background* constituído por uma mistura estatística uniforme. A forma de preparação de um estado pseudo-puro, ou seja, o conjunto de pulsos de RF que levam a tais estados, depende basicamente das interações de spin nuclear presentes no sistema em questão. Uma vez que os exemplos apresentados neste texto envolverão, sobretudo, a interação quadrupolar elétrica em sistemas de spins 3/2 (2-qubits), apresentaremos um método de criação de estados pseudo-puros para este caso específico, embora seja possível utilizar um processo bastante semelhante para o caso de dois spins 1/2 acoplados.

3.4.3. Criação de Estados Pseudo-Puros em um Sistema de Núcleos Quadrupolares.

Tal como descrito anteriormente em RMN um sistema de 2-qubits pode ser representado por um sistema de spins 3/2. Neste caso as interações dominantes são a interação Zeeman e a quadrupolar elétrica. Uma vez que a para altos campos magnéticos a ordem de grandeza da interação quadrupolar elétrica é muito menor que da interação Zeeman, o estado de equilíbrio térmico pode ser representado apenas considerando a última, ou seja, matriz densidade no equilíbrio térmico será dada por:

$$\rho_1 = U_1 \rho_{eq} U_1^\dagger = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_0}{4k_B T} \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix} \quad (72)$$

Um conjunto de duas seqüências de pulsos são utilizadas para criar os pseudo-puros neste sistema, sendo que o operador que representa a ação das seqüências de pulsos são:

$$U_1 = P_x^{23}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & i & 0 & i \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}; U_2 = P_{-x}^{23}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (73)$$

As ações destes operadores no estado de equilíbrio criam os estados:

$$\rho_1 = U_1 \rho_{eq} U_1^\dagger = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_0}{4k_B T} \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & -i \\ 0 & 0 & i & -1/2 \end{pmatrix} \quad (74)$$

$$\rho_2 = U_2 \rho_{eq} U_2^\dagger = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_0}{4k_B T} \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & i \\ 0 & 0 & -i & -1/2 \end{pmatrix}$$

Somando as quatro contribuições obtém-se o estado pseudo-puro $\rho_{00} = (\rho_1 + \rho_2)$:

$$\rho_{00} = \frac{1}{4}(1-\varepsilon) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (75)$$

onde $\varepsilon = \hbar\omega_0/2k_B T$. Deste modo, temos novamente uma matriz densidade média do tipo:

$$\bar{\rho} = \alpha \hat{1} + \varepsilon |00\rangle\langle 00| \quad (76)$$

Os estados pseudo-puros referentes aos estados $|01\rangle\langle 01|, |10\rangle\langle 10|, |11\rangle\langle 11|$ também podem ser criados de maneira similar utilizando as seqüências de pulsos representadas pelos operadores abaixo:

$$\begin{aligned} \rho_{00} &= [P_{\pm x}^{23}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi)] \rho_{eq} [P_{\pm x}^{23}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi)]^\dagger = \alpha \hat{1} + \varepsilon |00\rangle\langle 00| \\ \rho_{01} &= [P_x^{01}(\pi) P_{\pm x}^{23}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi)] \rho_{eq} [P_x^{01}(\pi) P_{\pm x}^{23}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi)]^\dagger = \alpha \hat{1} + \varepsilon |01\rangle\langle 01| \\ \rho_{10} &= [P_{\pm x}^{01}(\frac{\pi}{2}) P_x^{23}(\pi) P_x^{12}(\pi)] \rho_{eq} [P_{\pm x}^{01}(\frac{\pi}{2}) P_x^{23}(\pi) P_x^{12}(\pi)]^\dagger = \alpha \hat{1} - \varepsilon |10\rangle\langle 10| \\ \rho_{11} &= [P_{\pm x}^{01}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi)] \rho_{eq} [P_{\pm x}^{01}(\frac{\pi}{2}) P_x^{12}(\pi)]^\dagger = \alpha \hat{1} - \varepsilon |11\rangle\langle 11| \end{aligned} \quad (77)$$

Note que a fase inicial dos estados (sinal + ou -) não é a mesma para todos os estados pseudo-puros, porém trata-se de uma fase global, que não pode de fato ser detectada e, portanto, não tem influência no resultado final. Um outro fato é que as matrizes que representam os estados $|01\rangle\langle 01|$, $|10\rangle\langle 10|$ e $|11\rangle\langle 11|$ não são as matrizes densidades parciais detectáveis por RMN através dos processo de tomografia, mas podem ser obtidas diretamente através dessas, somando ou subtraindo um fator constante $\varepsilon/4$ vezes a matriz identidade.

Na Figura 1 estão mostrados alguns os espectros experimentais obtidos para cada um desses estados pseudo-puros discutidos anteriormente, juntamente com as respectivas matrizes densidade de desvio, obtidos pelo método de tomografia. Como se pode observar, os espectros só apresentam intensidade não nula para as transições onde há efetivamente uma diferença de população entre níveis adjacentes. Como os espectros para cada um dos estado são distintos entre si, é possível identificar o estado do sistema através do espectro de RMN. No entanto, é importante lembrar que o estado geral do sistema não é caracterizado somente por suas populações, mas pela matriz densidade total, que contém coerências quânticas que não contribuem para o espectro de RMN. Isso mostra a necessidade fundamental de se obter a matriz densidade pelo método de tomografia descrito anteriormente e cujos resultados experimentais em um sistema de spins 3/2 também estão mostrados na Figura 1. Note que, em cada caso, as populações de três dos quatro níveis de energia (diagonal da matriz densidade parcial) são iguais. Além disso, as coerências quânticas são todas nulas, caracterizando assim o estado pseudo-puro. Utilizando essa matriz parcial é possível obter as matrizes de estados pseudo-puros mostradas na Eq. (77).

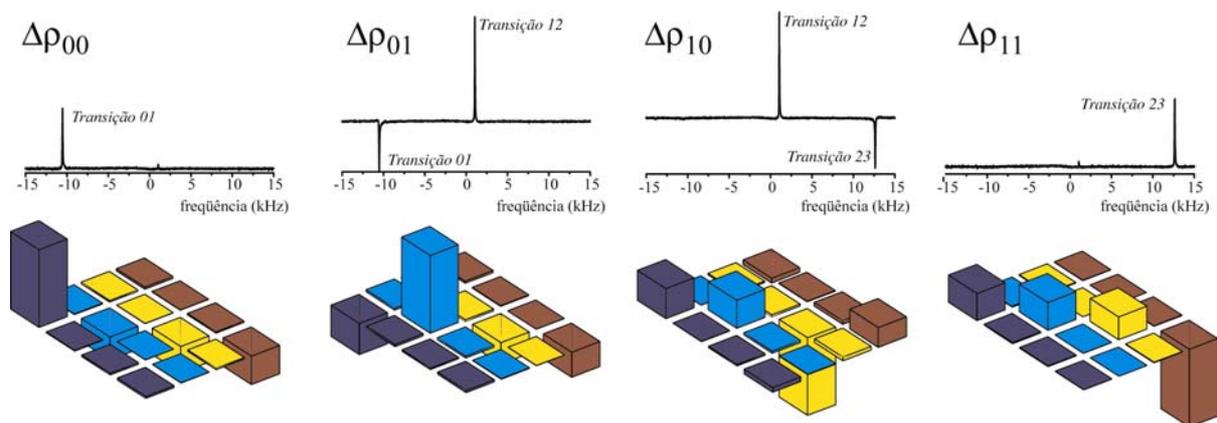


Figura 1: Espectros e partes reais das matrizes densidade parcial correspondendo aos quatro estados pseudo-puros da base computacional para RMN. As partes imaginárias possuem amplitude zero.

3.4.4. Implementação de Portas Lógicas em RMN

Uma vez demonstrada a possibilidade de se criar estados efetivamente puros por RMN vamos agora vislumbrar a implementação de operações lógicas utilizando a RMN. Existe a possibilidade de se realizar várias operações lógicas utilizando um sistema de spins em RMN.

Antes, porém, é interessante salientar uma diferença fundamental entre portas lógicas quânticas e clássicas. Portas lógicas clássicas geralmente são unidirecionais, ou seja, elas possuem um conjunto de entradas e um conjunto de saídas que não podem ser invertidas, isto é, são portas irreversíveis. Por outro lado, portas lógicas quânticas *devem* ser reversíveis. Esta obrigatoriedade ocorre porque a evolução de qualquer sistema quântico pode ser descrita por uma série de transformações unitárias reversíveis e, portanto, o conjunto delas também o será. Um outro conceito importante em computação binária diz respeito a existência de uma porta lógica universal. No caso de computação clássica, a porta universal é conhecida com Não-E (em inglês NAND). Isto significa que qualquer porta lógica clássica pode ser construída utilizando-se somente fios condutores e portas lógicas NAND. Em computação quântica é possível mostrar que se utilizando uma porta a dois *qubits* denominada CNOT, combinada com rotação geral de 1-*qubit* é possível implementar qualquer operação a dois *qubits* e, portanto, a porta CNOT é uma porta universal. A porta CNOT quântica possui duas entradas e duas saídas, estando o estados da saída condicionados aos de entrada de acordo com a *lógica* da porta. Uma outra característica interessante é a existência do *qubit* de controle, que permanece inalterado enquanto o outro *qubit* muda de acordo com a lógica da porta CNOT. Sendo assim, a porta CNOT pode ser aplicada tanto para o *qubit* B ($CNOT_B$), com *qubit* de controle em A ($CNOT_A$), quanto vice-versa. Na Tabela abaixo esta mostrada a tabela de entradas e saídas (tabela verdade) para as portas $CNOT_A$ e $CNOT_B$. Como pode ser notado, a lógica envolvida na porta CNOT é inverter o *qubit* de saída toda vez que *qubit* de entrada for 1, mantendo sempre o *qubit* de controle inalterado.

Tabelas verdade das portas $CNOT_A$ e $CNOT_B$ Ação nos operadores que representam as portas $CNOT_A$ e $CNOT_B$

$CNOT_A$		$CNOT_B$			
00	00	00	00	$CNOT_A 00\rangle = 00\rangle$	$(CNOT_B) 00\rangle = 00\rangle$
01	11	01	01	$CNOT_A 01\rangle = 11\rangle$	$(CNOT_B) 01\rangle = 01\rangle$
10	10	10	11	$CNOT_A 10\rangle = 10\rangle$	$(CNOT_B) 10\rangle = 11\rangle$
11	01	11	10	$CNOT_A 11\rangle = 01\rangle$	$(CNOT_B) 11\rangle = 10\rangle$

A implementação experimental da porta C-NOT a 2 *qubits* em RMN também pode ser realizada no sistema de spins 3/2 através das seqüência de pulsos representadas por:

$$U_{CNOT-A} = P_{12}^x(\pi)P_{23}^y(\pi)P_{12}^y(\pi) ; U_{CNOT-B} = P_{23}^x(\pi) \quad (78)$$

Aplicando-se esses operadores aos quatro estados pseudo-puros obtemos exatamente o resultado mostrado na tabela verdade acima, ou seja,

$$\begin{aligned}
U_{CNOT_A} \rho_{00} U_{CNOT_A}^\dagger &= \rho_{00} & U_{CNOT_B} \rho_{00} U_{CNOT_B}^\dagger &= \rho_{00} \\
U_{CNOT_A} \rho_{01} U_{CNOT_A}^\dagger &= \rho_{11} & U_{CNOT_B} \rho_{01} U_{CNOT_B}^\dagger &= \rho_{01} \\
U_{CNOT_A} \rho_{10} U_{CNOT_A}^\dagger &= \rho_{10} & U_{CNOT_B} \rho_{10} U_{CNOT_B}^\dagger &= \rho_{11} \\
U_{CNOT_A} \rho_{11} U_{CNOT_A}^\dagger &= \rho_{01} & U_{CNOT_B} \rho_{11} U_{CNOT_B}^\dagger &= \rho_{10}
\end{aligned} \tag{79}$$

onde os fatores de fase globais foram desprezados. Na Figura 2 estão mostrados os espectros de RMN e as respectivas matrizes densidade parciais tomografadas, que foram obtidos após a execução das seqüências de pulsos correspondentes ao operador CNOT_B, partindo-se dos vários estados pseudo-puros. Observa-se claramente a conversão de um estado pseudo-puro no correspondente de acordo com a tabela verdade da porta CNOT_B, a menos de um fator de fase global. Isto pode ser observado tanto nas respectivas matrizes densidade parcial quanto nos espectros de RMN. No entanto, a simples observação dos espectros de RMN não garante, a princípio, que temos os estados pseudo-puros corretos, pois os mesmos só garantem as correspondências entre os elementos diagonais das matrizes densidade parciais, antes e depois da aplicação operação CNOT_B.

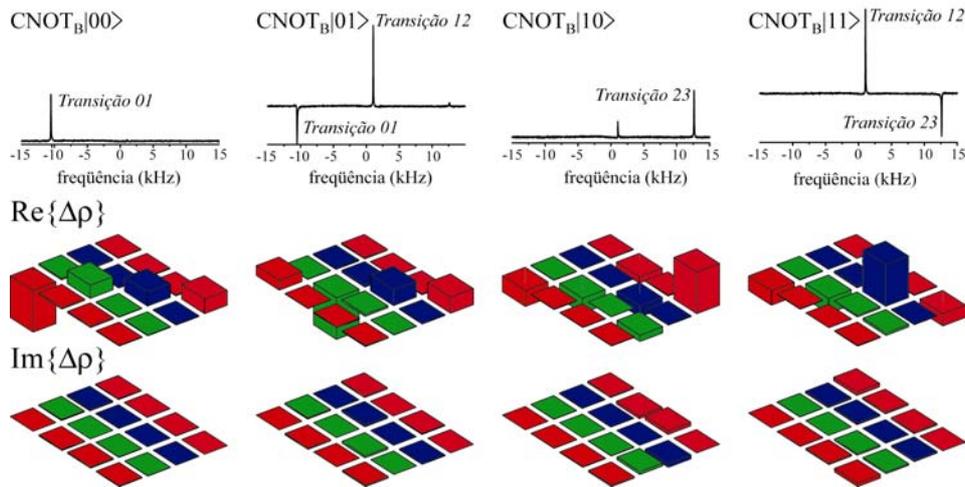


Figura 2: Espectros matrizes densidade parciais dos estados obtidos à partir da execução da porta lógica CNOT_B.

Uma outra operação lógica a um ou dois *qbits* importante para CQ é conhecida como operação de *Walsh Hadamard* (denominada apenas por Hadamard HD). Alguns operadores que realizam tal operação são:

$$U_{HD}^{2-qbit} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, U_{HD}^{qbitA} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } U_{HD}^{qbitB} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix} \tag{80}$$

A ação destes operadores em alguns estados é tal que:

$$\begin{aligned}
U_{HD}^{2-qbits} |00\rangle &= \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) \\
U_{HD}^{qbitA} |00\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |01\rangle) \quad ; \quad U_{HD}^{qbitA} |01\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) \\
U_{HD}^{qbitB} |10\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |11\rangle) \quad ; \quad U_{HD}^{qbitB} |11\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |11\rangle)
\end{aligned} \tag{81}$$

Como pode ser observada, a operação (ou porta l3gica) Hadamard cria uma superposi3o de dois ou mais estados qu4nticos. Este fato reflete diretamente a vantagem dos *qubits* frente aos bits cl3ssicos que n3o podem assumir esses estados superpostos. De fato, na grande maioria dos algoritmos qu4nticos uma porta *Hadamard* (*HD*) deve estar presente, j3 que ela cria os estados superpostos que s3o a chave do paralelismo qu4ntico. Utilizando os operadores definidos acima 3 f3cil mostrar que a porta *HD* 3 revers3vel isto 3, $U_{HD}^2 |\alpha\alpha\rangle = |\alpha\alpha\rangle$.

As opera3es de *Hadamard* a 1 *qubit* podem ser facilmente implementadas em um sistema de spins 3/2 atrav3s de uma seq3ncia de pulsos cujo o operador correspondente a tal seq3ncia de pulso 3:

$$U_{HD^{qbitA}} = P_{01}^{-x}(\pi) P_{01}^y(\pi/2) \quad ; \quad U_{HD^{qbitB}} = P_{23}^{-x}(\pi) P_{23}^y(\pi/2) \tag{82}$$

A a3o desses operadores nas matrizes densidades correspondentes aos estados pseudo-puros $|00\rangle$ e $|10\rangle$, respectivamente est3 exemplificada abaixo:

$$U_{HD^{qbitA}} \rho_{00} U_{HD^{qbitA}}^\dagger = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \alpha \hat{1} + \frac{\varepsilon}{2} (|00\rangle - |01\rangle)(\langle 00| - \langle 01|) \tag{83a}$$

$$U_{HD^{qbitA}} \rho_{01} U_{HD^{qbitA}}^\dagger = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} 1 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \alpha \hat{1} + \frac{\varepsilon}{2} (|00\rangle + |01\rangle)(\langle 00| + \langle 01|) \tag{83b}$$

$$U_{HD^{qbitB}} \rho_{10} U_{HD^{qbitB}}^\dagger = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} = \alpha \hat{1} + \frac{\varepsilon}{2} (|10\rangle - |11\rangle)(\langle 10| - \langle 11|) \tag{83c}$$

$$U_{HD^{qbitB}} \rho_{11} U_{HD^{qbitB}}^\dagger = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & 1 \end{pmatrix} = \alpha \hat{1} + \frac{\varepsilon}{2} (|10\rangle + |11\rangle)(\langle 10| + \langle 11|) \tag{83d}$$

Na Figura 3 est3 mostrado o resultado experimental da tomografia do estado obtido ap3s a execu3o da porta *Hadamard* no *qubit* B em um sistema de 2-*qubits*. Comparando com o resultado das matrizes anteriores nota-se a cria3o do estado desejado, a menos do fator constante que novamente 3 decorrente de estar mostrada a matriz de desvio. A opera3o 3 realizada com sucesso

tanto para o estado $|11\rangle$ quanto para o estado $|10\rangle$. A reversibilidade da operação também está demonstrada na Figura 3, onde está mostrado o resultado da tomografia do estado após a aplicação dupla da porta. Pode ser visto que o estado $|11\rangle$ e $|10\rangle$ são recuperados a menos de uma pequena diferença nas populações dos elementos diagonais, o que é atribuído aos efeitos de descorência durante a ação dos pulsos. Um detalhe interessante de se notar na Figura 3 é a possibilidade de distinguir fases relativas, por exemplo, os estados obtidos após a aplicação da porta HD^{qubitB} ao estado $|11\rangle$ e $|10\rangle$ são, ambos, combinações dos dois estados, mas com fases relativas diferentes. Essa possibilidade de se distinguir fases relativas é de extrema importância para CQ, pois muitos algoritmos quânticos codificam a informação exatamente nesta fase relativa que necessita então ser determinada. Finalmente, a aplicação da porta HD^{qubitB} ao estado $|11\rangle$ e $|10\rangle$ resultam em matrizes parciais que possuem os mesmos elementos diagonais e, portanto, os mesmos espectros. Isto demonstra que estados que envolvem superposição como neste caso, não podem ser caracterizados somente pelo espectro de RMN, sendo imprescindível a execução da tomografia da matriz densidade.

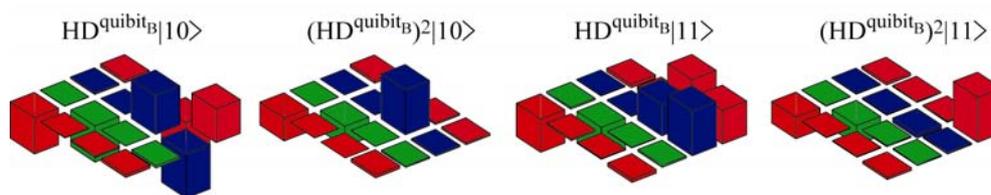


Figura 3: Matrizes densidade parciais dos estados obtidos à partir da execução da porta lógica HD^{qubitB} .

4. Bibliografia

- (1) Schmidt-Rohr, K.; Spiess, H. W. *Multidimensional Solid-State NMR and Polymers*; Academic Press: San Diego, 1996.
- (2) Goldman, M. *Quantum Description of High-Resolution NMR in Liquids*; Clarendon Press: Oxford, 1992.
- (3) Slichter, C. P. *Principles of Magnetic Resonance*; Springer-Verlag: Berlin, 1990.
- (4) Ernst, R. E.; Bodenhausen, G.; Wokaun, A. *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*; Clarendon Press: Oxford, 1987.
- (5) Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. *Quantum Mechanics*; John Wiley & Sons: New York, 1977.
- (6) Nielsen, M. A.; Chuang, I. *Quantum Computation and Quantum Information*; Cambridge University Press: Cambridge, 2002.
- (7) Chuang, I. L.; Gershenfeld, N.; Kubinec, M. *Physical Review Letters* 1998, 80, 3408-3411.
- (8) Jones, J. A. *Liquid-State NMR Quantum Computing* 2001, 38, 325.
- (9) Long, G. L.; Yan, H. Y.; Li, Y. S.; Tu, C. C.; Tao, J. X.; Chen, H. M.; Liu, M. L.; Zhang, X.; Luo, J.; Xiao, L.; Zeng, X. Z. *Physics Letters A* 2001, 286, 121-126.
- (10) Vandersypen, L. M. K.; Steffen, M.; Breyta, G.; Yannoni, C. S.; Sherwood, M. H.; Chuang, I. L. *Nature* 2001, 414, 883-887.
- (11) Khitrin, A. K.; Fung, B. M. *Journal of Chemical Physics* 2000, 112, 6963-6965.
- (12) Sinha, N.; Mahesh, T. S.; Ramanathan, K. V.; Kumar, A. *Journal of Chemical Physics* 2001, 114, 4415-4420.
- (13) Das, R.; Kumar, A. *Physical Review A* 2003, 68.
- (14) Sarthour, R. S.; deAzevedo, E. R.; Bonk, F. A.; Vidoto, E. L. G.; Bonagamba, T. J.; Guimarães, A. P.; Freitas, J. C. C.; Oliveira, I. S. *Physical Review A* 2003, 68.
- (15) Oliveira, I. S.; Sarthour, R. S.; Bulnes, J. D.; Guimarães, A. P.; deAzevedo, E. R.; Vidoto, E. L. G.; Bonagamba, T. J.; Freitas, J. C. C. In *Ciência Hoje*, 2003; Vol. 33, pp 23-29.
- (16) Nielsen, M. A.; Chuang, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information*; Cambridge University Press: Cambridge, 2002.
- (17) Murali, K.; Sinha, N.; Mahesh, T. S.; Levitt, M. H.; Ramanathan, K. V.; Kumar, A. *Physical Review A* 2002, 66.
- (18) Khitrin, A. K.; Ermakov, V. L.; Fung, B. M. *Physical Review Letters* 2002, 89.

Autores: Eduardo Ribeiro de Azevedo, Fábio Aurélio Bonk e Tito José Bonagamba. (31/05/2004)