

Figura 1.1: Crescimento do número de transistores para processadores Intel e Lei de Moore. Fonte: Wikipédia.

O grande interesse da comunidade científica em Computação Quântica, e também em Informação Quântica, se deve à larga gama de possíveis aplicações e desenvolvimentos, em várias áreas, como: matemática, física, química, etc. Ainda nos seus primórdios (pode-se comparar à época em que os transistores foram descobertos), a computação quântica surge como uma alternativa tecnológica com diversas vantagens sobre a computação clássica. Utilizando os conceitos desenvolvidos na área, alguns algoritmos quânticos já foram criados, e apresentam um surpreendente desempenho, sendo muito mais rápidos do que seus análogos clássicos. Outro desenvolvimento derivado da CQ é a criptografía quântica, já utilizada em redes recentemente criadas, que impossibilita a ação de "*hackers*" e possibilita a distribuição segura de chaves públicas ^[1]. Ao mesmo tempo, sistemas magnéticos de dimensões reduzidas ou na forma de filmes finos ou de sistemas micro e nanoestruturados têm apresentado um amplo espectro de fenômenos interessantes nas últimas décadas, entre eles a utilização das propriedades magnéticas dos elétrons - o spin - para realizar operações lógicas, uma técnica moderna que está sendo chamada de spintrônica ^[2]. O crescente interesse em CQ é devido principalmente a dois fatores:



Figura 2.1: Ressonância Magnética Nuclear crânio-encefálico multimodal.

Na RMN observa-se o que acontece com magnetização nuclear de um determinado elemento, o que é uma vantagem da RMN sobre outras técnicas, pois esta permite que um dos constituintes do material seja estudado separadamente. Por exemplo, em uma liga de FeCu (ferro-cobre) podemos estudar separadamente os campos hiperfinos sentido pelos núcleos do Fe e do Cu, isso se suas freqüências de ressonância não forem iguais.

2.1 Elementos da RMN

A *ressonância* é um dos fenômenos mais estudados na física, pois aparece em quase todos os tipos de sistemas, sejam eles mecânicos, acústicos, ópticos, elétricos e magnéticos. Esse fenômeno ocorre sempre que os estímulos externos possuem a freqüência próxima das freqüências de vibrações naturais dos sistemas. O fenômeno da ressonância manifesta-se também nos níveis molecular, atômico, eletrônico e nuclear. A RMN é de natureza magnética.

Embora não exista um "átomo clássico", podemos considerar uma visão do átomo de Bohr (1885-1962), supondo a existência de órbitas dos elétrons em torno do núcleo, descritas classicamente, embora determinadas por "regras de quantização".

O momento magnético produzido por uma corrente *i* , cujo perímetro envolve uma área $A(r^2\pi)$, é:

$$\boldsymbol{\mu} = i \, A \boldsymbol{n} \quad . \tag{2.1}$$



Figura 2.8: Espectros das partes reais das matrizes densidade parcial correspondendo aos quatro estados pseudopuros da base computacional para RMN. As partes imaginárias possuem amplitude zero.

2.5 Leitura do estado quântico de um sistema

Um procedimento que permite que a matriz densidade de um sistema seja totalmente determinada a partir de dados experimentais, que em nosso caso são os espectros de RMN, é denominado *tomografia de estado quântico*. O precursor da tomografia experimental usando a técnica de RMN foi G. L. Long ^[13], ele utilizou um sistema acoplado de dois spins 1/2. Mas tarde foi realizado para spin quadrupolares ^[9]. Nesta seção apresentaremos um método particular para tomografar a matriz densidade de um sistema de núcleos quadrupolares com I=3/2. Consideremos então uma matriz densidade geral, que se deseja tomografar:

$$\Delta \rho = \begin{pmatrix} a & x_a + iy_a & x_b + iy_b & x_c + iy_c \\ x_a - iy_a & b & x_d + iy_d & x_e + iy_e \\ x_b - iy_b & x_d - iy_d & c & x_f + iy_f \\ x_c - iy_c & x_e - iy_e & x_f - iy_f & d \end{pmatrix}.$$
(2.98)

O método descrito em [9] é baseado no fato que as amplitudes do espectro de RMN estão relacionadas somente pelos elementos da matriz diagonal de $\Delta \rho$, após o CYCLOPS:

qualquer operação requisitada pela computação quântica a partir deste conjunto denominado de universal^[4].

A porta *CNOT* quântica possui duas entradas e duas saídas, estando os estados de saída condicionados aos de entrada. Portanto, esta é uma porta controlada, ou seja, são portas que atuam sobre certos *q-bits* alvo somente se todos os *q-bits* de controle estiverem no estado $|1\rangle$. De forma mais geral, seja *U* um operador unitário de 1 *q-bit*. Uma operação *U-controlada* ^[4] é uma operação tendo *q-bits* de controle e *q-bits* alvo. Se o controle for $|1\rangle$, a operação *U* é aplicada aos *q-bits* alvo; caso contrário nada acontece. Em símbolos: $|a\rangle|b\rangle \rightarrow |a\rangle U^{c}|b\rangle$. A operação *U-controlada* é representada pelo circuito mostrado na Figura 3.3.



Figura 3.2: Exemplo de representação de um circuito que implementa a porta U controlada.

A porta *CNOT* pode ser aplicada tanto para o q-bit A (*CNOT*_A), com q-bit de controle em A, ou quanto no q-bit B (*CNOT*_B).

A porta *Hadamard* transforma $|0\rangle$ em $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ (primeira coluna de *H*), e $|1\rangle$ em $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ (segunda coluna de *H*). Isto é, ela cria uma superposição de dois ou mais estados quânticos. Na representação da esfera de Bloch a operação *Hadamard* corresponde a uma rotação em torno do eixo *y* de 90°, seguida de uma reflexão sobre o plano XY.

A porta $\pi/8$ (*T*) é uma porta de fase, que atua sobre um *q-bit*. Na representação da esfera de Bloch, mencionada anteriormente, o *q-bit* no estado dado pela equação 3.1, pode ser visualizado como um ponto (θ, φ) sobre a esfera de raio $a = \cos \theta/2$ e $b = e^{i\varphi} sen \theta/2$. Nesse referencial a porta *T* corresponde a uma rotação azimutal de $\pi/4$, ao redor do eixo *z*.

Há uma diversidade de portas lógicas, além das anteriores, a porta de fase $S=T^2$ (denotada S) a porta SWAP que atua em dois *q-bits* trocando seus estados, as matrizes de como é mostrado na figura abaixo. O tempo corre da esquerda pra direita, a porta SWAP pode ser decomposta em 3 operações *CNOT* como ilustrado na Figura 3.3.



Figura 3.3: Circuito quântico que descreve a operação lógica *SWAP*. Ao lado esquerdo utilizando três portas *CNOT*, a primeira e a terceira com o controle em a e a segunda com o controle e b. Ao lado direito a notação usual.

No contexto da computação quântica, todas as portas lógicas devem ser representadas por operadores unitários, e no caso da RMN elas serão pulsos de campos magnéticos que oscilam na faixa de rádio-freqüência (rf) ou evoluções temporais sem a presença dos pulsos de rf, somente na presença de um campo magnético constante B_{g} .

3.3 Algoritmos quânticos

Da mesma maneira que os computadores atuais usam algoritmos para executarem operações pré-definidas ou resolverem problemas matemáticos, os computadores quânticos também devem seguir algoritmos para executarem suas tarefas.

Os algoritmos quânticos são divididos em duas classes. Uma classe é exponencialmente mais rápida, e a outra classe é somente quadraticamente mais rápida que seus análogos clássicos. Os algoritmos quânticos mais famosos são o de Grover (busca), Deutsch, Simon e Shor (fatoração). O algoritmo de Grover é da classe dos quadraticamente mais rápido, enquanto que os outros três são exponencialmente mais rápidos. Eles são mais rápidos devido o uso da transformada de Fourier quântica (TFQ), que é o tema deste trabalho. A TFQ será discutida com mais detalhe na próxima seção.

O primeiro a ser desenvolvido foi o algoritmo de Deutsch ^[5], que faz uso de dois *q*bits. Utilizando o algoritmo de Deutsch, é possível verificar se uma função binária f(x) é constante, f(0) = f(1), ou é balanceada $f(0) \neq f(1)$. O algoritmo de Deutsch combina a superposição de estados com uma outra propriedade quântica conhecida como interferência, e

$$R_{2}H_{1}|j_{1}j_{2}...j_{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_{1}j_{2}} |1\rangle \right) |j_{2}...j_{n}\rangle$$

$$R_{3}R_{2}H_{1}|j_{1}j_{2}...j_{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_{1}j_{2}j_{3}} |1\rangle \right) |j_{2}...j_{n}\rangle$$
(3.11)

Esta operação deve ser repetida nos outros q-bits do sistema. Depois de todas as R_k portas aplicadas temos:

$$R_{n} \dots R_{2} H_{1} | j_{1} j_{2} \dots j_{n} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(| 0 \rangle + e^{2\pi i 0. j_{1} j_{2} \dots j_{n}} | 1 \rangle \right) | j_{2} \dots j_{n} \rangle.$$
(3.12)

Seqüências de operações similares para os demais *q*-bits devem ser realizadas; aplicase a porta *Hadamard* seguida das portas controladas R_k . Procedendo dessa maneira para cada um dos *q*-bits do sistema, no final, os estados devem ser revertidos com a operação de troca (*SWAP*), fazendo com que a TFQ seja implementada, veja equação 3.7. A (figura 3.4) representa o circuito para computar a TFQ, foram omitidas da figura as operações de troca por motivo de clareza.



Figura 3.4: Circuito para a transformada de Fourier quântica.

Estimar a fase de um estado quântico é interessante, pois resolve um problema não trivial e muito interessante do ponto de vista físico: o de como conhecer o autovalor associado a um dado autovetor de um operador unitário. Seu verdadeiro uso, no entanto, aparece do fato de que outros problemas interessantes podem ser reduzidos ao problema da estimativa de fase, como busca de ordem e fatoração, mencionados anteriormente.

estado pseudo-puro 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, eles só garantem as correspondências entre os elementos diagonais das matrizes densidade parciais, antes e depois da aplicação operação $CNOT_{R}$.



Figura 3.5: Espectros e matrizes densidade parciais dos estados obtidos à partir da execução da porta lógica $CNOT_B$.

Uma outra operação lógica a um ou dois *q-bits* importante para CQ é a conhecida operação de *Walsh Hadamard* (como relatado anteriormente). Alguns operadores que realizam tal operação são:

3 – Computação Quântica

informação exatamente nesta fase relativa que necessita então ser determinada. Finalmente, a aplicação da porta $H^{q-bit B}$ ao estado $|10\rangle e|11\rangle$ 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 3.6: Matrizes densidade parciais dos estados $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ e $|11\rangle$ obtidos à partir da execução da porta lógica $H^{q-bit B_2}$.^[10]

3.7 Referências

[1] A. M. Turing. *On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem.* Proc. Lond. Math, 42, 230, 1936.

[2] C.E. Shannon. *A mathematical theory of communication*. Bell Sys-tem Tech. J, 27, 379, 1948.

[3] Taub, H. Circuitos Digitais e Microprocessadores. Ed. McGraw-Hill, 1982.

[4] Nielsen, M.A. and I.L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

[5] Cleve, R., A. Ekert, C. Macchiavello and M. Mosca. *Quantum algorithms Rivisited*. Proc.R. Soc. Lond. A, 454, p. 339-354, 1998.

[6] Chuang, I.L., N. Gershenfeld and M. Kubinec. *Experimental implementation of fast quantum searching*. Physical Review Letters, 80, p. 3408-3411, 1998.

[7] Shor, P. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. SIAM J. Comput, 26, p. 1484-1509, 1997.

[8] Vandersypen, L.M.K., M. Steffen, G. Breyta, C.S. Yannoni, M.H. Sherwood and I.L.

experimentos ficavam comprometidos. O espectro experimental utilizado para a obtenção do valor do acoplamento quadrupolar é mostrado na figura 4.2.



Figura 4.3: O espectro utilizado para atualizar o valor de ω_0 .

Nos experimentos, os pulsos de *rf* possuem certas limitações, como a de potência, e também de duração que devem ser consideradas. Valores extremos desses parâmetros devem ser penalizados durante o processo de busca dos SMP's, para que a seqüência obtida possa ser utilizada em simulações e implementações de outros algoritmos. Com relação a amplitude de *rf*, observou-se que para um pulso de excitação de $4\mu s$ de duração, a resposta da magnetização obedecia a uma função senoidal com bastante fidelidade para ângulos de nutação de até 90°. Para amplitudes maiores começava-se a observar um desvio do comportamento senoidal. Com relação à duração máxima de cada segmento, foi aplicado o limite de até 20 μs para evitar que efeitos de relaxação comprometessem o desempenho do pulso, os tempos de relaxação do sistema utilizado são $T_1 \approx 15$ ms e $T_2 \approx 4$ ms.

O programa de otimização da sequência SMP's, foi escrito na linguagem Matlab, e está descrito no apêndice A.2. Este não gera diretamente o arquivo na "linguagem" de operação do espectrômetro. É necessário gerar uma macro do software que controla o

espectrômetro. O software utilizado é o VNMR 6.1B e a linguagem da macro é a MAGICAL II ^[11]. A implementação experimental dos SMP's foi feita utilizando-se o recurso de pulsos modulados do espectrômetro. Os pulsos são passados para o espectrômetro através de um arquivo escrito em ASCII e com extensão RF ^[11,12]. Esse arquivo deve conter três colunas representando a fase, a amplitude e a duração, nessa ordem. Para a implementação da TFQ os SMP's foram gerados a partir desses três parâmetros seguido de um tempo sem aplicação do campo de rádio-freqüência, o tempo de evolução livre (*delay*). Esse tempo é devido à característica intrínseca a qualquer hardware. São os tempos de espera necessários para que cada instrução comece a ser executada. A omissão dos mesmos pode implicar em um acúmulo significativo de erros ao final da operação. Além disso, a evolução livre é uma porta lógica necessária para a construção da TFQ nestes sistemas.



Figura 4.4: Na sequência intermediária são criados os estados psedo-puros, aplicado em seguida o SMP. E por fim feito a leitura.

O espectrômetro de RMN utilizado neste trabalho é um modelo Varian UNITYINOVA com campo de 9,38 T. Este está localizado no Instituto de Física da USP de São Carlos (IFSC-USP). Os experimentos foram realizados com a colaboração dos pesquisadores Tito Bonagamba, Eduardo de Azevedo e com alguns alunos do grupo. Antes da aplicação do SMP's que implementa a TFQ, é feita uma simples rotina de calibração e depois um espectro de referência. Em seguida cria-se um estado pseudo-puro, e para isso 4 pulsos de *rf* são necessários. Esses pulsos são aplicados em repetições distintas do experimento de forma a produzir o processo de média temporal, discutida no capítulo 2. Na figura 4.4 (acima), se encontra representada de maneira simplificada a rotina para a implementação da seqüência SMP.

Depois da criação do estado pseudo-puro, roda-se a macro da porta lógica, neste caso a TFQ. As amplitudes dos espectros obtidos são medidas e salvas em um arquivo. Para reconstruir a matriz densidade correspondente a essas medidas, foi desenvolvido pelo grupo de RMN do Instituto de Física de São Carlos - IFSC - um código em linguagem C que permite a obtenção da matriz densidade imediatamente após o término do experimento e no próprio computador que controla o espectrômetro. A tomografía ^[3] de estado quântico é feita com 7 pulsos, esta é discutida com mais detalhe na seção 2.2.6.

Como descrito anteriormente, antes de qualquer implementação no contexto da computação quântica, é necessário a implementação de estados que se comportem como estados puros. Nas figuras abaixo, encontram-se ilustradas as matrizes densidade medidas dos estados pseudo-puros criados, comparados com a previsão teórica.



Figura 4.5: Tomografía do estado quântico pseudo-puro $|00\rangle$. Sendo (a) a parte real da matriz densidade de desvio do estado puro experimental, e (b) a parte imaginária, comparadas com as previsões teóricas (c) e (d), respectivamente.



Figura 4.6: Tomografia do estado quântico pseudo-puro $|01\rangle$. Sendo (a) a parte real da matriz densidade de desvio do estado puro experimental, e (b) a parte imaginária, comparadas com as previsões teóricas (c) e (d), respectivamente.



Figura 4.7: Tomografia do estado quântico pseudo-puro $|10\rangle$. Sendo (a) a parte real da matriz densidade de desvio do estado puro experimental, e (b) a parte imaginária, comparadas com as previsões teóricas (c) e (d), respectivamente.



Figura 4.8: Tomografía do estado quântico pseudo-puro $|11\rangle$. Sendo (a) a parte real da matriz densidade de desvio do estado puro experimental, e (b) a parte imaginária, comparadas com as previsões teóricas (c) e (d), respectivamente.

As figuras acima apresentam as tomografias das matrizes densidades dos estados pseudo-puros. Como se pode observar há uma boa concordância nas matrizes densidades de desvio simuladas e experimentais.

A partir da criação dos estados pseudo-puros, onde quatro pulsos foram utilizados, foi aplicada a seqüência de pulsos (SMP's) que encontramos para a implementação da TFQ. Nas figuras 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12 estes resultados estão apresentados para os quatro estados da base computacional. Como havia pequenas imperfeições nos estados pseudo-puros, simulamos também a implementação da TFQ nos estados pseudo-puros obtidos dos experimentos, para efeitos de comparação, e os resultados também estão apresentados nas figuras, 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12, juntamente com previsões puramente teóricas.



Figura 4.9: Em (a) e (b), encontram-se ilustradas as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio do sistema após a aplicação da TFQ no estado quântico pseudo-puro $|00\rangle$. Em (c) e (d), mostramos as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio após a aplicação teórica da TFQ, como discutido no texto, para efeitos de comparação. Em (e) e (f), encontram-se ilustrados os resultados das simulações puramente teóricas.



Figura 4.10: Em (a) e (b), encontram-se ilustradas as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio do sistema após a aplicação da TFQ no estado quântico pseudo-puro $|01\rangle$. Em (c) e (d), mostramos as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio após a aplicação teórica da TFQ, como discutido no texto, para efeitos de comparação. Em (e) e (f), encontram-se ilustrados os resultados das simulações puramente teóricas.



Figura 4.11: Em (a) e (b), encontram-se ilustradas as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio do sistema após a aplicação da TFQ no estado quântico pseudo-puro $|10\rangle$. Em (c) e (d), mostramos as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio após a aplicação teórica da TFQ, como discutido no texto, para efeitos de comparação. Em (e) e (f), encontram-se ilustrados os resultados das simulações puramente teóricas.



Figura 4.12: Em (a) e (b), encontram-se ilustradas as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio do sistema após a aplicação da TFQ no estado quântico pseudo-puro $|11\rangle$. Em (c) e (d), mostramos as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio após a aplicação teórica da TFQ, como discutido no texto, para efeitos de comparação. Em (e) e (f), encontram-se ilustrados os resultados das simulações puramente teóricas.

Os estados de Bell possui características interessantes principalmente por suas propriedades de emaranhamento. Estes são normalmente a base dos algoritmos de criptografia, alem de aparecerem com freqüência nos demais algoritmos quânticos. Nas figuras 4.13 e 4.14 estão mostradas as matrizes densidade de desvio, dos estados Bell: $|\beta_{00}\rangle$ e

$$|\beta_{11}\rangle$$
, onde $|\beta_{00}\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$ e $|\beta_{11}\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$, comparadas com as respectivas provisões

teóricas.



Figura 4.13: Construção do estado de Bell $|\beta_{00}\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$. Em (a) a tomografia da parte real da matriz densidade do estado Bell experimental, (b) parte imaginária. Nas letras (c) e (d) são as matrizes densidades simuladas deste estado.



Figura 4.14: Construção do estado de Bell $|\beta_{11}\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$. Em (a) a parte real da matriz densidade do estado de Bell experimental, (b) parte imaginária. Nas letras (c) e (d) são as matrizes simuladas deste estado.

Aplicamos a TFQ também nos estados de Bell, cujas a tomografías mostramos acima. Os resultados encontram se apresentados nas figuras 4.15 e 4.16, para os estados $|\beta_{00}\rangle$ e $|\beta_{11}\rangle$.



Figura 4.15: Em (a) e (b), encontram-se ilustradas as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio do sistema após a aplicação da TFQ no estado quântico de Bell $|\beta_{00}\rangle$. Em (c) e (d), mostramos as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio após a aplicação teórica da TFQ, como discutido no texto, para efeitos de comparação. Em (e) e (f), encontram-se ilustrados os resultados das simulações puramente teóricas.



Figura 4.16: Em (a) e (b), encontram-se ilustradas as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio do sistema após a aplicação da TFQ no estado quântico de Bell $|\beta_{11}\rangle$. Em (c) e (d), mostramos as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio após a aplicação teórica da TFQ, como discutido no texto, para efeitos de comparação. Em (e) e (f), encontram-se ilustrados os resultados das simulações puramente teóricas.

Como é possível observar dos resultados, podemos dizer que obtivemos êxito na implementação da Transformada de Fourier Quântica, utilizando um sistema de RMN contendo núcleos quadrupolares, apesar de alguns erros. No entanto, alguns destes erros podem ser minimizados. Por exemplo, uma das fontes de erro é a variação de temperatura da amostra, que embora tenha sido pequena, influencia a interação quadrupolar. Como a calibração dos pulsos depende deste acoplamento, pequenos erros dos pulsos de *rf* podem se propagar ao longo do experimento.

Outros fatores são as precisões no controle das fases e durações de cada pulso, que neste caso é limitado em 0,5 graus e 0,5 μ s. Estes fatores podem ser corrigidos, embora não