

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS  
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS  
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: FÍSICA

**GUSTAVO MEHANNA UHDRE**

**INVARIANTES DINÂMICOS APLICADOS EM  
COMPUTAÇÃO QUÂNTICA E INFORMAÇÃO  
QUÂNTICA PARA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA  
NUCLEAR**

Ponta Grossa  
2017

**GUSTAVO MEHANNA UHDRE**

**INVARIANTES DINÂMICOS APLICADOS EM  
COMPUTAÇÃO QUÂNTICA E INFORMAÇÃO  
QUÂNTICA PARA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA  
NUCLEAR**

Dissertação apresentada ao Programa de  
Pós - Graduação em Ciências, área de  
concentração em Física, da Universidade  
Estadual de Ponta Grossa, como requi-  
sito parcial para a obtenção do título de  
Mestre em Ciências/Física .

Orientador: Prof. Dr. Ruben Auccaise  
Estrada

Ponta Grossa

2017

**Ficha Catalográfica**  
**Elaborada pelo Setor de Tratamento da Informação BICEN/UEPG**

Uhdre, Gustavo Mehanna  
U29        Invariantes dinâmicos aplicados em  
             computação quântica e informação quântica  
             para ressonância magnética nuclear/  
             Gustavo Mehanna Uhdre. Ponta Grossa, 2017.  
             84f.

             Dissertação (Mestrado em Ciências -  
             Área de Concentração: Física),  
             Universidade Estadual de Ponta Grossa.  
             Orientador: Prof. Dr. Ruben Auccaise  
             Estrada.

             1.Teorema Adiabático. 2.Invariantes  
             Dinâmicos. 3.Computação Quântica.  
             I.Estrada, Ruben Auccaise. II.  
             Universidade Estadual de Ponta Grossa.  
             Mestrado em Ciências. III. T.

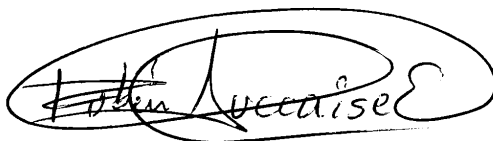
CDD: 530.145

## TERMO DE APROVAÇÃO

GUSTAVO MEHANNA UHDRE

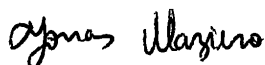
### “INVARIANTES DINÂMICOS APLICADOS EM COMPUTAÇÃO QUÂNTICA E INFORMAÇÃO QUÂNTICA PARA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR”

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.



Orientador:

Prof. Dr. Ruben Auccaise Estrada  
Departamento de Física, UEPG/PR



Prof. Dr. Jonas Maziero  
Departamento de Física, UFSM/RS



Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade  
Departamento de Matemática e Estatística, UEPG/PR

Ponta Grossa, 27 de março de 2017.

# Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Ruben Aucasse Estrada e ao Prof. Dr. Antonio Sérgio Magalhães de Castro por dedicarem seu tempo para me ajudar com as orientações do trabalho.

Aos amigos que sempre estiveram junto, nas discussões sobre física e seminários.

Aos meus familiares que sempre me apoiaram e me ajudaram.

A CAPES pelo suporte financeiros.

# Resumo

Este trabalho tem como objetivo comparar a eficiência entre duas maneiras alternativas de realizar protocolos de computação quântica. A primeira, é chamada de computação quântica adiabática, que é realizada através dos conceitos do teorema adiabático. A segunda, é chamada de computação quântica não adiabática, que é realizada através das ideias de invariantes dinâmicos. Esses protocolos serão apresentados em um contexto teórico de Ressonância Magnética Nuclear, sem a realização experimental.

**Palavras-chave:** Teorema Adiabático. Invariantes Dinâmicos. Computação Quântica.

# Abstract

This work aims to compare the efficiency between two alternative ways of performing quantum computing protocols. The one is called adiabatic quantum computation, which is to realize through the concepts of the adiabatic theorem. The second is called non-adiabatic quantum computation, which is performed through ideas of dynamic invariants. These protocols will be presented in a theoretical context of Nuclear Magnetic Resonance, without the experimental realization.

**Keywords:** Adiabatic Theorem. Dynamic Invariants. Quantum Computation.

# Lista de Figuras

1.1	Pêndulo de massa $m$ oscilando enquanto o comprimento do fio varia com o tempo. . . . .	12
2.1	Deslocamento das linhas espectrais ao aplicar-se um campo magnético sobre o núcleo atômico de $spin\ 1/2$ . Antes da aplicação do campo, o espectro é degenerado. Após a aplicação do campo, ele se divide em dois. . . . .	22
2.2	Representação de um núcleo atômico no centro de um sistema de coordenadas, executando um movimento de precessão quando imerso em um campo magnético aplicado na direção do eixo $z$ . . . . .	23
2.3	Representação de um vetor $r$ que encontra-se girando em relação a ambos os sistemas de coordenadas, onde $\Phi$ é o ângulo entre os sistemas de coordenadas em um instante de tempo . . . . .	24
2.4	Magnetização em um sistema de Ressonância Magnética Nuclear. A figura (a) representa a magnetização transversal (2.43) após o pulso de rádio frequência sobre o plano $(x, y)$ . A figura (b) representar a magnetização longitudinal (2.45) após o pulso de rádio frequência ao longo do eixo $z$ . Após um intervalo de tempo a magnetização em $(x, y)$ desaparecem, e magnetização em $z$ vai para a magnetização de equilíbrio $M_0$ . . . . .	30
4.1	Representação de um circuito quântico que avalia $f(0)$ e $f(1)$ simultaneamente. O $q$ -bit de controle $x$ entra em um estado de superposição $( 0\rangle +  1\rangle)/\sqrt{2}$ e o $q$ bit alvo $y$ entra em um estado $ 0\rangle$ , o operador de transformação $\hat{U}_f$ atua no sistema, o que resulta em $ \psi\rangle$ . . . . .	38
4.2	Representação do Circuito Quântico para implementar o algoritmo de Deutsch. . . . .	39
4.3	Figura ilustra o circuito para a realização do algoritmo de Grover. No qual o sistema inicia-se com todos os estados em $ 0\rangle^{\otimes n}$ , sobre os quais é aplicada uma porta Hadamard, seguida do operador de Grover $\mathcal{O}\sqrt{N}$ , onde $N$ é o número de elementos do sistema ( $N = 2^n$ e $n$ é o número de $q$ -bits do sistema). O $ket\  q\rangle_n$ é o <b>q-bit</b> de controle relacionado ao oráculo . . . . .	43



4.4	A figura ilustra as oscilações da aplicação do algoritmo de Grover. Em que observa-se que se o número de aplicações ultrapassar $\sqrt{N}$ , a probabilidade de encontrar o estado diminui, de modo que ele só volta a ter uma máxima probabilidade após novas aplicações. A figura (a) é para um sistema de 2 <i>q-bit</i> . A figura (b) é para um sistema de 10 <i>q-bits</i> . . . . .	43
5.1	Gráfico referente aos auto-valores do Hamiltoniano (5.27) em função do parâmetro $x[s(\tau)]$ , em que $x$ é o parâmetro externo aplicado ao sistema e $s(\tau) = \tau$ para $\tau \in [0, 1]$ é a forma na qual ele deve ser aplicado. Observa-se que ao aplicar um campo sobre o sistema modulado pela função $s(\tau)$ , considerando $\alpha_0 = 1/2$ , as linhas do espectro de energia se modificam. . . .	51
5.2	Curva da Braquistócrona Quântica Adiabática $s(\tau)$ , para diferentes valores de $\alpha_0$ . . . . .	55
5.3	A figura ilustra a função (5.132), para $n = 1$ , a o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono $J = 215\text{Hz}$ e o tempo de evolução adiabática é de 20ms. . . . .	68
5.4	A figura ilustra a função (5.132) para $n = 2$ , o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono $J = 215\text{Hz}$ e o tempo de evolução adiabática é de 1s para a curva em vermelho e de 0.01s para a curva em azul. . . . .	68
5.5	A figura ilustra a função (5.132) para $n = 3$ , o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono $J = 215\text{Hz}$ e o tempo de evolução adiabática é de 1s para a curva em vermelho e de 0.01s para a curva em azul. . . . .	69
5.6	Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.89) com os valores de $J=215\text{Hz}$ , $n=1$ , $\epsilon = 2.10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é 25kHz o deslocamento no tempo é $d = 0.006\text{s}$ , o estado inicial apresenta-se em um estado de superposição e o final em um dos estados da base de Bell, o tempo de evolução adiabática é de $T \simeq 20\text{ms}$ . . . . .	71
5.7	Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.90) com os valores de $J=215\text{Hz}$ , $n=1$ , $\epsilon = 2.10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é 25kHz o deslocamento no tempo é $d = 0.006\text{s}$ , em que o estado final em um dos estados da base de Bell, o tempo de evolução adiabática é de $T \simeq 20\text{ms}$ . . . . .	72
5.8	Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.91) com os valores de $J=215\text{Hz}$ , $n=1$ , $\epsilon = 2.10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é 25kHz o deslocamento no tempo é $d = 0.006\text{s}$ , o tempo de evolução adiabática é de $T \simeq 20\text{ms}$ . Onde a mudança do Hamiltoniano no tempo não afeta a forma do estado. . . . .	72

5.9	Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.92) com os valores de $J=215\text{Hz}$ , $n=1$ , $\epsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é 25kHz o deslocamento no tempo é $d = 0.006\text{s}$ , o tempo de evolução adiabática é de $T \simeq 20\text{ms}$ . Onde a mudança do Hamiltoniano no tempo não afeta a forma do estado. . . . .	73
5.10	Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.89), após a evolução do sistema. . . . .	73
5.11	Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.90), após a evolução do sistema. . . . .	74
5.12	Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.91), após a evolução do sistema. . . . .	74
5.13	Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.92), após a evolução do sistema. . . . .	74
5.14	Representação da distância entre os estados durante o tempo de evolução para computação adiabática e não adiabática. A figura (a) representa a evolução adiabática para $\nu=25\text{kHz}$ e $\epsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ . A figura (b) representa a evolução não adiabática para $n=1$ , $J=215\text{Hz}$ , $\epsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ e a frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de 25kHz e o deslocamento de tempo $d = 0.006\text{s}$ . O tempo de evolução adiabática é de aproximadamente 28ms. . . . .	76
5.15	Figura mostra a distância entre os estados usando processo de evolução não adiabática para $n=2$ , $J=215\text{Hz}$ , $\epsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ e a frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de 25kHz e o deslocamento de tempo $d = 0.001\text{s}$ . O tempo de evolução adiabática é de aproximadamente 28ms . . . . .	76
5.16	Gráfico da distância para a curva adiabática e não adiabática. Para a curva adiabática tem-se $\nu=25\text{kHz}$ , $\epsilon = \sqrt{2} \cdot 10^2$ , e o tempo de evolução adiabática de 4ms. A curva não adiabática tem-se $n=1$ , $J=215\text{Hz}$ , $\epsilon = \sqrt{2} \cdot 10^{-3}$ e a frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de 25kHz e o deslocamento de tempo $d = 0.006\text{s}$ , e o tempo de evolução é de 4ms. . . . .	77
5.17	Cuvas de distância para a função $f(\tau, n)$ discretizada no tempo, com $n=1$ , e o tempo de evolução é de $T \cong 28\text{ms}$ o valor da frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de 25kHz e o deslocamento de tempo $d=0.006\text{s}$ . . . . .	78

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>10</b>
<b>1 Sistemas Adiabáticos Clássicos e Quânticos</b>	<b>12</b>
1.1 Sistema Adiabático Clássico . . . . .	12
1.2 Sistemas Quânticos Adiabáticos . . . . .	14
<b>2 Ressonância Magnética Nuclear (RMN)</b>	<b>21</b>
2.1 Introdução ao tópico . . . . .	21
2.2 Referencial Girante . . . . .	24
2.3 Variação da Magnetização . . . . .	28
<b>3 Invariantes Dinâmicos</b>	<b>31</b>
3.1 Contexto Clássico . . . . .	31
3.2 Invariantes Dinâmicos no contexto quântico . . . . .	34
<b>4 Computação Quântica</b>	<b>36</b>
4.1 Produto Direto . . . . .	36
4.2 Computação Clássica e Quântica . . . . .	37
4.3 Paralelismo . . . . .	37
4.4 Algoritmo de Deutsch . . . . .	39
4.5 Algoritmo de Busca (Grover) . . . . .	40
4.6 Rotina para gerar o operador de Grover . . . . .	41
<b>5 Computação Quântica Adiabática e Não adiabática</b>	<b>45</b>
5.1 Computação Adiabática . . . . .	45
5.2 Braquistócrona Quântica Adiabática . . . . .	48
5.3 Tempo de Evolução Adiabática . . . . .	55
5.4 Computação Quântica Não adiabática . . . . .	57
5.5 Operador Densidade . . . . .	69
5.6 Distância . . . . .	75

**Conclusões** 80

5.7 Perspectivas Futuras . . . . . 80

**Referências Bibliográficas** 81

# Introdução

Na virada do século  $XX$  uma revolução estava em curso nas ideias científicas, uma série de experimentos realizados em laboratórios da época, não eram compatíveis quando se tentavam explicá-los usando Mecânica Clássica. Alguns exemplos, como a catástrofe do ultra violeta, que previa energia infinita emitida por um corpo negro quando o comprimento de onda chegava ao ultra violeta, como também o elétron orbitando um núcleo atômico, a previsão clássica mostrava que uma carga elétrica sobre a ação de uma força, fazia com que esta carga emitisse radiação de modo que ela perderia energia ao circular o núcleo e acabaria espiralando para o núcleo. Assim como também experimentos que nem se quer havia uma explicação como efeito foto elétrico, em que incidia-se um feixe de luz com um certo comprimento de onda sobre uma placa de metal e, para determinada frequência de luz, os elétrons eram retirados da placa, enquanto que para outras frequências nada acontecia. Foi necessário que pessoas com uma grande intuição entrasse em cena, para enfrentar tudo que havia sido feito até a época e resolver esses problemas. O trabalho dessas pessoas levou a criação do que conhecemos hoje como Mecânica Quântica. Ela vem sendo desde então a teoria mais testada na área da física e até o momento todas suas previsões estão sendo bem sucedidas. Podemos dizer que ela é a descrição mais precisa conhecida sobre o mundo, de modo que hoje ela é a base para a computação e informação quântica.

A computação foi outro grande triunfo da humanidade durante o século  $XX$ , o surgimento da computação foi devido a uma necessidade do homem em querer realizar cálculos de forma mais rápida e prática. Desenvolvendo assim ferramentas que fossem capazes de realizar este trabalho, essa busca tornou-se cada vez mais importante. Principalmente devido à necessidade que os problemas físicos apresentavam, as leis da física mostravam-se em forma de equações diferenciais na qual realização de simulação computacional é de grande ajuda. Os princípios teóricos e os fundamentos matemáticos para o desenvolvimento do primeiro computador foi iniciado por Alan Turing em 1936, que criou a Máquina de Turing, capaz de ser programada para realizar uma tarefa (1). Foi na década de 70 que surgiu a ideia de usar Mecânica Quântica para a realização de computação quântica através de suas leis, proposto por Paul Benioff em 1973 (2). Em 1981 Richard Feynman apresentou em uma conferência no MIT uma proposta de se fazer computação quântica e que esses computadores teriam uma capacidade de processamento superior aos

computadores clássicos (3). Ele realizou estudos que possibilitaram caracterizar as limitações desses computadores em simular sistemas quânticos, o que deu o impulso inicial para que a comunidade científica tenta-se realizar essas ideias. Foi então que em 1985 David Deutch (4) desenvolveu a primeira máquina de Turing quântica, que seria capaz de simular outro computador quântico, e em 1994 surgiu o primeiro algoritmo quântico feito pelo matemático Peter Shor (5), que era capaz de fatorar grandes números com uma eficiência melhor que os computadores convencionais. Foi a partir disso que outros algoritmos quânticos foram surgindo como o algoritmo de busca (6), feito por Lov Grover em 1996. Este algoritmo seria capaz de resolver problemas de busca em uma base de dados com  $N$  elementos de forma mais eficaz que os algoritmos clássicos. De modo que os computadores convencionais precisam de um número maior de processos para encontrar a solução que é da ordem de  $N$ . O algoritmo desenvolvido por Grover necessitaria de apenas  $\sqrt{N}$ , algo surpreendente em relação ao ganho.

Outro fator interessante é que além desses algoritmos serem mais eficientes que os algoritmos clássicos, também é possível buscar uma forma mais eficiente para realizá-los, e umas das ideias para isso é a chamada computação quântica adiabática. O teorema adiabático, é uma maneira alternativa de realizar esses algoritmos de uma forma em que não há dissipação de energia durante a dinâmica do sistema. Outra alternativa para a realização de computação quântica é a computação quântica não adiabática (7), na qual é usada a ideia dos Invariantes Dinâmicos para realização dos processos dinâmicos do sistema de modo mais eficiente, entretanto com um custo energético.

O presente trabalho tem como principal objetivo idealizar e discutir, num contexto teórico, aplicações do Teorema adiabático e Invariantes dinâmicos para realização do algoritmo de busca de Grover. Além disso, são apresentados argumentos caracterizando alguns parâmetros do Hamiltoniano de um sistema de dois *spins* nucleares para uma possível implementação experimental via a técnica de RMN.

A dissertação foi dividida em 5 capítulos, o primeiro capítulo apresenta o teorema adiabático, mostrando-se uma ideia clássica para um sistema formado por um pêndulo simples, onde a frequência angular do sistema muda com o tempo, em seguida estas ideias são estendidas para um sistema quântico, de modo que é feita todas as discussões e demonstrações necessárias para se ter um entendimento sobre o teorema. No capítulo 2 apresenta-se as ideias básicas de Ressonância Magnética Nuclear. No capítulo 3 é apresentado os Invariantes Dinâmicos, começando com mecânica clássica expondo a sua importância e também em um contexto quântico. Já o capítulo 4 apresenta-se a computação quântica e alguns algoritmos que são importantes, como de Deutch e Grover, junto da ideia de paralelismo quântico. O capítulo 5 apresenta como realizar computação adiabática e não adiabática. As ferramentas matemáticas necessárias para a realização do trabalho serão apresentadas conforme a necessidade de seu uso nos capítulos.

# Capítulo 1

## Sistemas Adiabáticos Clássicos e Quânticos

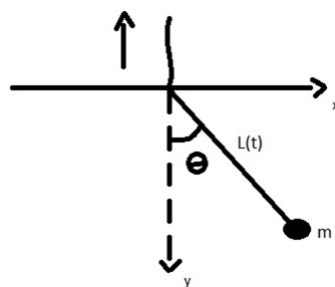
O teorema adiabático é uma maneira de tratar sistemas físicos em que o Hamiltoniano que rege a dinâmica do sistema evolui com o tempo. Tornando-se, assim, uma ferramenta para computação quântica (1,8,9), e controle de transição de fase em cadeia de spins (10), por exemplo.

Neste capítulo, portanto, o teorema adiabático será tratado de início no contexto clássico (11–13) e, então, será estendido para o contexto quântico (14,15), no intuito de melhor ilustrar os conceitos associados ao teorema.

### 1.1 Sistema Adiabático Clássico

Para exemplificar o conceito de um sistema adiabático em Mecânica Clássica, pode-se utilizar um Pêndulo Simples, o qual é constituído de uma massa  $m$  conectada a um fio de comprimento variável  $L(t)$ , figura (1.1).

Figura 1.1: Pêndulo de massa  $m$  oscilando enquanto o comprimento do fio varia com o tempo.



Fonte: O autor

O teorema adiabático diz que quando o sistema mecânico possui uma grandeza que

muda lentamente com o tempo devido à influência de algum agente externo, diz-se que o sistema está sofrendo uma transformação adiabática. Para o caso do pêndulo simples ilustrado na figura (1.1), a mudança no comprimento do fio acarreta uma mudança na frequência angular do sistema, uma vez que

$$\omega(t) = \sqrt{g/L(t)}, \quad (1.1)$$

em que  $g$  é a aceleração da gravidade sob a qual o sistema está sujeito. Para que o sistema evolua de maneira adiabática, pode-se inferir que o comprimento do fio deve mudar lentamente com o tempo e, conseqüentemente, sua frequência de oscilação também. Com isso, é possível definir um tempo interno  $T_i$  que representa o próprio sistema e um tempo externo  $T_e$  sobre o qual os parâmetros mudam sensivelmente no tempo. Neste caso, é de fundamental importância que  $T_e \gg T_i$ .

Um método para resolver um problema oscilante onde a frequência muda com o tempo, consiste em partir da solução já conhecida do sistema, onde os parâmetros não mudam com o tempo. No caso de um sistema oscilante geral, usa-se o Oscilador Harmônico Simples (OHS), cuja equação diferencial que descreve o sistema é (11, 16, 17)

$$\ddot{x} + \eta^2 x = 0. \quad (1.2)$$

Em que  $x$  representa a posição onde a massa  $m$  se encontra,  $\ddot{x}$  é a derivada segunda em relação ao tempo e,  $\eta$  é a frequência de oscilação do sistema. A solução da equação (1.2) é dada por

$$x(t) = A \cos(\eta t + \phi), \quad (1.3)$$

com  $A$  sendo a amplitude de oscilação,  $\eta$  a frequência de natural de oscilação do sistema e  $\phi$  um fator de fase. Com isso, pode-se calcular a energia total do sistema, a qual é dada pela soma das energias cinética e potencial, na forma que segue

$$E(t) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \eta^2 x^2. \quad (1.4)$$

Observa-se que quando a frequência de oscilação varia lentamente, a energia do sistema é afetada, como mostra (1.4), uma vez que a energia depende da frequência. Dessa forma, é possível identificar qual é a taxa de variação da energia em relação ao tempo. Derivando (1.4) em relação ao tempo, têm-se

$$\frac{dE}{dt} = m \dot{x} \ddot{x} + m \eta^2 x \dot{x} + m \eta x^2 \frac{d\eta}{dt}, \quad (1.5)$$

onde é possível notar que para a equação (1.5) existem termos que podem ser chamados de termos rápidos e termos lentos. Os termos rápidos são os termos que dependem de  $\dot{x}$  e  $\ddot{x}$ , já os termos lentos são os que dependem de  $d\eta/dt$ , devido ao fato da frequência variar



lentamente no tempo, conforme o proposto. Assim, para que esses termos tenham uma variação significativa no sistema, é necessário usar o conceito de valor médio (18), no caso a média temporal que permite uma melhor visualização do que acontece com a energia do sistema. Dessa forma a equação (1.5) pode ser reescrita como

$$\frac{dE}{dt} = \langle m\dot{x}\ddot{x} + m\eta^2 x\dot{x} \rangle + \langle m\eta x^2 \rangle \frac{d\eta}{dt}. \quad (1.6)$$

Observando a equação (1.6), é possível notar que os dois primeiros termos possuem uma dependência em  $x$  e suas respectivas derivadas em relação ao tempo. Além disso, estes termos apresentam o produto de seno e cosseno, conforme a equação (1.3), o que resulta em um valor médio nulo após uma oscilação completa. Dessa forma, o único termo que resta é o termo que contém a taxa de variação de  $\eta$  em relação ao tempo, devido ao fato de que  $x$  está elevado ao quadrado, de modo que (1.6) torna-se

$$\frac{dE}{dt} = \langle m\eta x^2 \rangle \frac{d\eta}{dt}, \quad (1.7)$$

logo

$$\frac{dE}{E} = \frac{d\eta}{\eta}, \quad (1.8)$$

integrando essa equação chegamos a

$$\frac{E}{\eta} = cte. \quad (1.9)$$

A grandeza física que representa a energia sobre a frequência é chamada de invariante adiabático, de modo que ela se mantém constante quando a frequência do sistema muda lentamente no tempo. Esta é a ideia de adiabaticidade em Mecânica Clássica. Uma mudança gradual de condições externas ao sistema define um processo adiabático. É possível também encontrar outros trabalhos relacionados aos assuntos de adiabaticidade que podem ser encontrados em (12,13), onde é feita uma generalização para o Lagrangiano e o Hamiltoniano.

## 1.2 Sistemas Quânticos Adiabáticos

Estudos feitos sobre o Teorema adiabático para um sistema quântico foram realizados por Born e Fock em 1928 (19) que foram motivadas pelos trabalhos de Ehrenfest em 1916 (20), em que é feita uma tentativa de correspondência entre os invariantes adiabáticos com seus observáveis quânticos.

A equação fundamental que governa a evolução temporal de um sistema quântico é a

equação de Schrödinger (21–23), que pode ser escrita na forma

$$\hat{\mathcal{H}}(t) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t}, \quad (1.10)$$

onde  $i$  é a unidade imaginária,  $\hbar$  é a constante de Planck dividido por  $2\pi$  e  $|\psi(t)\rangle$  é o auto-estado que possui toda a informação sobre o sistema quântico no instante de tempo  $t$ . Já no lado esquerdo tem-se  $\hat{\mathcal{H}}$ , que é conhecido como operador Hamiltoniano e está associado à energia do sistema. Este operador também é chamados de observáveis, pois possuem auto-valores reais. Estes operadores atuam no espaço de Hilbert  $\mathbb{H}$  (21–23). O espaço de Hilbert é um espaço vetorial complexo munido de um produto interno, sendo este espaço uma generalização do espaço Euclidiano, de maneira que não precisa-se estar restrita a um número finito de dimensões. Também é preciso enfatizar que este operador Hamiltoniano é hermitiano, ou seja,  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}^\dagger$ , isso nos garante que seus auto-valores são números reais, e também que a evolução do sistema seja unitária. Para descrever a evolução temporal do sistema físico de interesse é necessário resolver a equação (1.10), de forma que sua solução formal é dada por

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t_0)\rangle, \quad (1.11)$$

sendo  $\hat{U}(t)$  o operador de evolução temporal, o qual assume a forma

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int \hat{\mathcal{H}}(t) dt\right), \quad (1.12)$$

para o caso em que o Hamiltoniano comuta para diferentes instantes de tempo  $[\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\mathcal{H}}(t')] = 0$ . Nota-se que este operador é unitário, isto é,  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$ , o que significa que a aplicação deste operador sobre um vetor de estado não altera sua norma. Desse modo, tem-se a garantia de que a amplitude de probabilidade é conservada.

O teorema adiabático (14) afirma que um sistema quântico inicialmente preparado no  $n$ -ésimo auto-estado do Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}_i(t)$  evoluirá por meio da equação de Schrödinger para o  $n$ -ésimo auto-estado de  $\hat{\mathcal{H}}_f(t)$ , a menos de um fator de fase multiplicativo. Além disso, este teorema permite realizar a evolução temporal do sistema, sem que haja transições para um estado excitado. Isso é realizado em sistemas discretos (sistema com diferentes níveis de energia acessíveis) e não degenerados (que não possua dois auto-valores iguais).

Supondo que  $|\phi_n(t)\rangle$  representa o  $n$ -ésimo auto-vetor do operador  $\hat{\mathcal{H}}(t)$ , então

$$\hat{\mathcal{H}}(t) |\phi_n(t)\rangle = E_n(t) |\phi_n(t)\rangle, \quad (1.13)$$

em que o conjunto  $\{|\phi_n(t)\rangle\}$  forma base instantânea do sistema, a qual satisfaz a pro-

priedade de ortogonalidade

$$\langle \phi_n(t) | \phi_m(t) \rangle = \delta_{mn}. \quad (1.14)$$

Onde (1.14) representa o produto interno entre os vetores da base, sendo  $\delta_{mn}$  o delta de Kronecker, que possui a seguinte propriedade (24,25)

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}. \quad (1.15)$$

Outra propriedade importante dos vetores desta base, é a relação completeza (21)

$$\sum_n |\phi_n(t)\rangle \langle \phi_n(t)| = 1, \quad (1.16)$$

que permite escrever um *ket* arbitrário  $|\alpha\rangle$  no espaço da base de  $\hat{\mathcal{H}}$ , da seguinte forma,

$$|\alpha\rangle = \sum_n |\phi_n(t)\rangle \langle \phi_n(t) | \alpha \rangle.$$

A equação de Schrödinger (1.10) pode ser resolvida supondo que o estado  $|\psi(t)\rangle$  é uma combinação linear dos auto-vetores instantâneos, a menos de um fator de fase multiplicativo conforme enunciado no teorema adiabático. Desta forma,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)}, \quad (1.17)$$

em que  $c_n(t)$  é uma função complexa, que está associada às amplitudes de probabilidade de encontrar o sistema no auto-vetor  $|\phi_n(t)\rangle$ . O termo  $\theta_n(t)$ , chamado de fator de fase dinâmico, é dado por

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt. \quad (1.18)$$

Isso generaliza o fator de fase padrão para o caso em que  $E_n(t)$  varia com o tempo. Este fator poderia ter sido inclusa no termo  $c_n(t)$ , mas é conveniente fatorar essa parte porque ela também pode estar presente no Hamiltoniano independente do tempo.

Para encontrar a forma de  $c_n(t)$ , pode-se substituir (1.17) em (1.10),

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + c_n(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle + i c_n(t) |\phi_n\rangle \dot{\theta}_n(t)] e^{i\theta_n(t)} = \\ \sum_n c_n(t) \hat{\mathcal{H}}(t) |\phi_n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)}, \end{aligned} \quad (1.19)$$

o termo da direita de (1.19), usá-se a relação (1.13), de modo que

$$i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + c_n(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle + ic_n(t) |\phi_n(t)\rangle \dot{\theta}_n(t)] e^{i\theta_n(t)} = \sum_n c_n(t) E_n(t) |\phi_n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)}. \quad (1.20)$$

Da equação (1.18), pode-se escrever

$$E_n(t) = -\hbar \dot{\theta}_n(t), \quad (1.21)$$

que ao ser substituída em (1.20), obtém-se

$$i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + c_n(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle + ic_n(t) |\phi_n(t)\rangle \dot{\theta}_n(t)] e^{i\theta_n(t)} = -\hbar \sum_n c_n(t) |\phi_n(t)\rangle \dot{\theta}_n(t) e^{i\theta_n(t)}, \quad (1.22)$$

resultando em

$$i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + c_n(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle] e^{i\theta_n(t)} = 0. \quad (1.23)$$

Multiplicando (1.23) por  $\langle \phi_m(t) |$  e usando a relação (1.14) (14, 15), tem-se

$$\sum_n \dot{c}_n(t) \delta_{m,n} e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n(t) \left\langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \right\rangle e^{i\theta_n}, \quad (1.24)$$

de modo que

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \left\langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \right\rangle e^{[i\theta_n(t) - i\theta_m(t)]}. \quad (1.25)$$

O termo de projeção de (1.25), que representa a projeção da taxa de variação no tempo de  $|\phi_n(t)\rangle$  em  $\langle \phi_m(t) |$ , pode ser encontrado a partir da derivada de (1.13), de forma que

$$\dot{\hat{\mathcal{H}}}(t) |\phi_n(t)\rangle + \hat{\mathcal{H}}(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle = \dot{E}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + E_n(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle, \quad (1.26)$$

multiplicando (1.26) por  $\langle \phi_m(t) |$ , tem-se

$$\langle \phi_m(t) | \dot{\hat{\mathcal{H}}}(t) |\phi_n(t)\rangle + \langle \phi_m(t) | \hat{\mathcal{H}}(t) \left| \dot{\phi}_n(t) \right\rangle = \dot{E}_n(t) \delta_{m,n} + E_n(t) \left\langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \right\rangle. \quad (1.27)$$

como  $\hat{\mathcal{H}}(t)$  é Hermitiano,  $\langle \phi_m(t) | \hat{\mathcal{H}}(t) = \langle \phi_m(t) | E_m(t)$ , portanto (1.27), assume a forma

$$\langle \phi_m(t) | \dot{\hat{\mathcal{H}}}(t) |\phi_n(t)\rangle + E_m(t) \left\langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \right\rangle = \dot{E}_n(t) \delta_{m,n} + E_n(t) \left\langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \right\rangle, \quad (1.28)$$

reagrupando os termos

$$\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle = (E_n(t) - E_m(t)) \langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \rangle + \dot{E}_n(t) \delta_{mn}. \quad (1.29)$$

Para  $n = m$  tem-se que

$$\langle \phi_n(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle = \dot{E}_n(t). \quad (1.30)$$

A equação (1.30), mostra que a taxa de variação do Hamiltoniano afeta diretamente a taxa de variação da energia, bem como para o caso em que  $n \neq m$ :

$$\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n \rangle = (E_n(t) - E_m(t)) \langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_n(t) \rangle. \quad (1.31)$$

Dessa forma, utilizando o resultado obtido em (1.31) em (1.25) obtêm-se a equação diferencial para o coeficiente  $c_m(t)$ , dada por

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_m(t) \rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}. \quad (1.32)$$

Adota-se  $g_{nm}(t) = E_n(t) - E_m(t)$  como a diferença de energia do sistema, que comumente é encontrado em textos denominado de *gap*. Desse modo, é possível realizar a integração de (1.32) no tempo, o que resulta em

$$c_m(t) = c_m(0) - \int_0^{t'} c_m(t) \langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_m(t) \rangle dt - \sum_{n \neq m} \int_0^{t'} c_n(t) \frac{\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle}{(g_{nm}(t))} e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} dt. \quad (1.33)$$

Conforme (26), pode-se afirmar uma condição geral para a validade do teorema adiabático, tal que

$$\max_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle}{g_{mn}(t)} \right| \ll \min_{0 \leq t \leq T} |g_{mn}|. \quad (1.34)$$

Em que  $T$  é o tempo de evolução adiabática. Isto pode ser interpretado de modo que para cada dois pares de auto energia, o valor esperado da taxa de variação do Hamiltoniano no tempo, em unidades de *gap*, seja muito menor do que o próprio *gap*.

Para o caso particular da equação (1.32), em que  $c_n(0) = 0$  e  $c_m(0) = 1$  com  $n \neq m$ , a solução fica dada por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m e^{i\gamma_m(t)} e^{i\theta_m(t)} |\phi_m(t)\rangle, \quad (1.35)$$

em que o termo  $\gamma_m(t)$  é dado por

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle \phi_m(\tau) | \dot{\phi}_m(\tau) \rangle d\tau. \quad (1.36)$$

A equação (1.35) mostra que durante a evolução, o sistema se mantém no  $m$ -ésimo autoestado, adquirindo apenas um fator de fase. Este novo fator de fase que aparece no sistema é conhecido como fator de fase geométrico ou fase de Berry (27). Exemplos de aplicações em um sistema de *spin* 1/2 interagindo com um campo magnético podem ser encontrados em (14).

A condição sobre o tempo de evolução adiabática pode ser feita através da equação (26)

$$\frac{d}{dt}[c_m(t)e^{-i\gamma_m(t)}] = e^{-i\gamma_m(t)} \left[ \dot{c}_m(t) + \langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_m(t) \rangle c_m(t) \right], \quad (1.37)$$

que permite reescrever a equação (1.32), de modo que obtém-se

$$\frac{d}{dt}[c_m(t)e^{-i\gamma_m(t)}] = - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{-i\gamma_m(t)} \frac{\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle}{g_{nm}(t)} e^{-i/\hbar \int_0^t g_{nm}(t') dt'}. \quad (1.38)$$

Por questões de generalidade, faz-se o uso de um parâmetro adimensional, que é definido da seguinte maneira

$$\tau = \frac{t}{T},$$

em que  $T$  é o tempo de evolução adiabática. Nessa nova parametrização (1.38) torna-se

$$\frac{d}{d\tau}[c_m(\tau)e^{-i\gamma_m(\tau)}] = - \sum_{n \neq m} T c_n(\tau) e^{-i\gamma_m(\tau)} \frac{\langle \phi_m(\tau) | \dot{\mathcal{H}}(\tau) | \phi_n(\tau) \rangle}{g_{nm}(\tau)} e^{-iT/\hbar \int_0^\tau g_{nm}(\mu) d\mu}. \quad (1.39)$$

Adotando uma variável independente tal que  $\tau \mapsto s$  e realizando a integração de (1.39), com  $s \in [0, \tau]$ , obtém-se

$$c_m(\tau)e^{-i\gamma_m(\tau)} = c_m(0) - \sum_{n \neq m} \int_0^\tau ds c_n(s) e^{-i\gamma_m(s)} \frac{\langle \phi_m(s) | \mathcal{H}'(s) | \phi_n(s) \rangle}{g_{nm}(s)} e^{-\frac{iT}{\hbar} \int_0^s g_{nm}(\mu) d\mu}, \quad (1.40)$$

em que  $\mathcal{H}'(s)$  representa a derivada  $dH(s)/ds = \mathcal{H}'(s)$ . Definindo

$$F_{nm}(s) = c_n(s) e^{-i\gamma_m(s)} \langle \phi_m(s) | \mathcal{H}'(s) | \phi_n(s) \rangle, \quad (1.41)$$

e reescrevendo (1.40), tem-se

$$c_m(\tau)e^{-i\gamma_m(\tau)} = c_m(0) - \sum_{n \neq m} \int_0^\tau ds \frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}(s)} e^{-iT/\hbar \int_0^s g_{nm}(\mu) d\mu}. \quad (1.42)$$

Com isso, o termo integrante da equação (1.42), pode ser reescrito como (26)

$$\frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}(s)} e^{-iT\theta(\mu)} = \frac{i}{T} \left[ \frac{d}{ds} \left( \frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}^2(s)} e^{-iT\theta(\mu)} \right) - e^{-iT\theta(\mu)} \frac{d}{ds} \left( \frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}^2(s)} \right) \right], \quad (1.43)$$

em que  $\theta(\mu) = \frac{1}{\hbar} \int_0^s g_{nm}(\mu) d\mu$ . Dessa forma (1.42), torna-se

$$c_m(\tau)e^{-i\gamma_m(\tau)} = c_m(0) - \frac{i}{T} \sum_{n \neq m} \left[ \frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}^2(s)} e^{-iT\theta(\mu)} - \frac{F_{nm}(0)}{g_{nm}^2(0)} - P(s) \right], \quad (1.44)$$

com

$$P(s) = \int_0^\tau ds e^{-iT\theta(\mu)} \frac{d}{ds} \left( \frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}^2(s)} \right). \quad (1.45)$$

Na equação acima é possível notar que o objetivo de ter um desacoplamento dos coeficientes  $c_n(t)$  é alcançado apenas se a somatória puder ser ignorada em relação ao coeficiente  $c_m(0)$ . Isto pode ser verificado através do uso do Lema de Riemann-Lebesgue (26):

$$I = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_a^b F(x) e^{iT x} dx = 0. \quad (1.46)$$

A partir deste lema a equação (1.44) fica dada por

$$c_m(\tau)e^{-i\gamma_m(\tau)} = c_m(0) - \frac{i}{T} \sum_{n \neq m} \left[ \frac{F_{nm}(s)}{g_{nm}^2(s)} e^{-iT\theta(\mu)} - \frac{F_{nm}(0)}{g_{nm}^2(0)} \right], \quad (1.47)$$

que mostra que se o tempo total de evolução for suficientemente grande, então é possível ter uma evolução quase desacoplada dos coeficientes  $c_n(\tau)$ . O quão grande deve ser o tempo de evolução para que essa condição seja realizada será abordada no capítulo 5, onde se fará uso do teorema adiabático com o intuito de realizar protocolos de computação quântica.

## Capítulo 2

# Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

Neste capítulo serão abordados tópicos sobre Ressonância Magnética Nuclear (RMN) (28), a qual servirá de base para a realização de protocolos de Computação Quântica Adiabática e Computação Quântica não adiabática (7).

### 2.1 Introdução ao tópico

A RMN é uma técnica experimental que surgiu na metade do século XX, que descreve a interação de um momento de dipolo magnético com um campo magnético. Alguns núcleos atômicos possuem este momento de dipolo intrínseco, chamado de *spin* (28, 29). No eletromagnetismo clássico a energia de interação de um momento de dipolo magnético  $\vec{\mu}$  interagindo com um campo magnético  $\vec{B}$ , é dada por (30–32)

$$\mathcal{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.1)$$

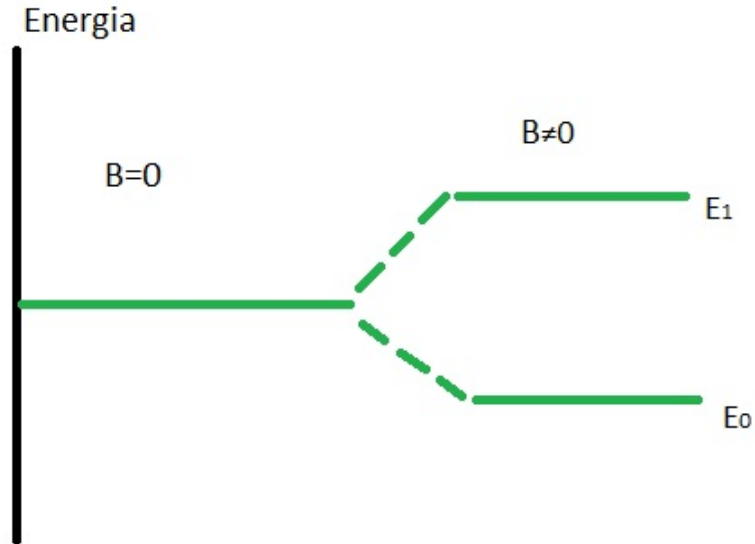
O processo de quantização para este tipo de sistema leva a associar o momento de dipolo magnético  $\vec{\mu}$  a um operador vetorial de momento angular  $\hat{I}$  (22, 28).

Sabe-se que no interior dos núcleos atômicos existem prótons e nêutrons, cujos os valores de *spin*  $I = 1/2$  (férmions) (33, 34). Quando a diferença de prótons e nêutrons no interior do núcleo atômico for par, o momento angular resultante é nulo, não sendo possível de realizar medidas em RMN. Porém, se existir um próton ou nêutron desemparelhado, então o momento angular total será igual ao deste único núcleon. Tais núcleos que possuem esta característica, como os isótopos  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  (35, 36), podem ser estudados em RMN.

A RMN consiste em aplicar um campo sobre o núcleo na direção do eixo  $z$ . A interação do campo com o núcleo gera uma magnetização resultante sobre o eixo  $z$ , e será melhor discutida na seção 2.3. Este tipo de interação é conhecida como efeito Zeeman (34). O efeito Zeeman consiste no deslocamento das linhas espectrais de energia do sistema, de modo que para uma partícula de *spin*  $1/2$  o espectro desdobra-se em dois, conforme a figura 2.1.



Figura 2.1: Deslocamento das linhas espectrais ao aplicar-se um campo magnético sobre o núcleo atômico de *spin* 1/2. Antes da aplicação do campo, o espectro é degenerado. Após a aplicação do campo, ele se divide em dois.



Fonte: O autor

O Hamiltoniano para um sistema quântico que descreve a interação entre o campo magnético em  $z$  e o *spin*, é dado por

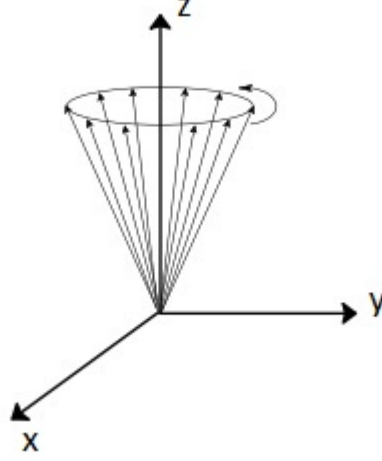
$$\hat{\mathcal{H}} = -\hbar\gamma B_0 \hat{I}_z, \quad (2.2)$$

cujos seus auto-valores são

$$E_1 = \frac{\hbar\gamma B_0}{2}, \quad E_0 = -\frac{\hbar\gamma B_0}{2}, \quad (2.3)$$

em que  $\gamma$  é o fator giro magnético, que depende da espécie do núcleo atômico. As componentes de  $\hat{I}$  são as matrizes de Pauli onde a notação  $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$  é utilizada para diferenciar da notação do *spin* do elétron  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ . O produto entre o fator giro magnético e o campo é a frequência de Larmor (28),  $\omega_0 = B_0\gamma$ , que é o movimento de precessão natural do sistema, ilustrado na figura 2.2.

Figura 2.2: Representação de um núcleo atômico no centro de um sistema de coordenadas, executando um movimento de precessão quando imerso em um campo magnético aplicado na direção do eixo z.



Fonte: Adaptado de (37)

Os operadores de momento angular satisfazem as seguintes relações (21–23):

$$\hat{I}^2 |I, m\rangle = I(I+1)\hbar^2 |I, m\rangle, \quad (2.4)$$

$$\hat{I}_z |I, m\rangle = m\hbar |I, m\rangle. \quad (2.5)$$

Em que  $I = \frac{N}{2}$  com  $N \in \mathbb{Z}_+$ ,  $m = -I, -I+1, \dots, I-1, I$  e  $|I, m\rangle$  auto-vetores comuns a  $\hat{I}^2$  e  $\hat{I}_z$ , devido ao fato de que  $[\hat{I}^2, \hat{I}_z] = 0$  (21–23).

A representação matricial dos operadores de *spin* 1/2 são

$$\hat{I}_x \doteq \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \hat{I}_y \doteq \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{I}_z \doteq \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

Para observar o fenômeno da ressonância, um pulso de rádio frequência é aplicado sobre o *spin*, na forma

$$\vec{B}_1(t) = B_1(\vec{i} \cos(\omega_{rf}t + \phi) + \vec{j} \sin(\omega_{rf}t + \phi)), \quad (2.7)$$

onde  $\vec{i}$  e  $\vec{j}$  são versores, e a frequência  $\omega_{rf}$  é a frequência angular do pulso aplicado. Neste caso, o Hamiltoniano que descreve o sistema pode ser escrito como

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hbar\omega_0\hat{I}_z - \hbar\omega_1(\hat{I}_x \cos(\omega_{rf}t + \phi) + \hat{I}_y \sin(\omega_{rf}t + \phi)), \quad (2.8)$$

sendo  $\omega_1 = -\gamma B_1$  a frequência na qual o campo de rádio frequência é aplicado, que pode ser interpretada como a força que age sobre o *spin* para que ele transicione de um estado

para outro.

## 2.2 Referencial Girante

A descrição clássica do movimento do *spin* no campo magnético pode ser descrito através do torque aplicado sobre o sistema (28,31,32)

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (2.9)$$

Sabe-se que o torque é igual à taxa de variação temporal do momento angular total  $\vec{J}$ , sendo  $\vec{J}$  a soma dos momentos de *spin* e orbital:

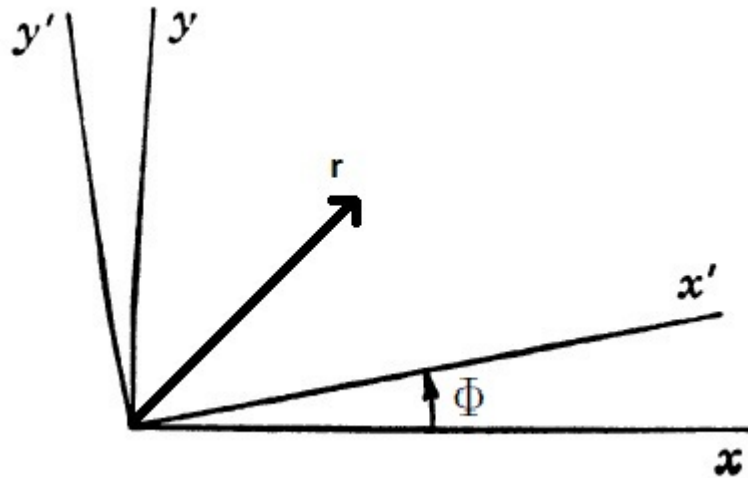
$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{J}}{dt}. \quad (2.10)$$

Escrevendo  $\vec{J} = \vec{\mu}/\gamma$ , a expressão para o torque torna-se

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \vec{\mu} \times \gamma \vec{B}, \quad (2.11)$$

que descreve o comportamento do momento magnético na presença de um campo magnético. Uma abordagem conveniente é adotar um sistema de coordenadas no qual o momento magnético  $\vec{\mu}$  não varie com o tempo, este sistema é denominado referencial girante e está representado na figura 2.3

Figura 2.3: Representação de um vetor  $r$  que encontra-se girando em relação a ambos os sistemas de coordenadas, onde  $\Phi$  é o ângulo entre os sistemas de coordenadas em um instante de tempo



Fonte: O autor

O referencial  $(x', y', z')$  rotaciona com uma velocidade angular  $\vec{\Omega}$ . Do ponto de vista deste referencial, os versores associados ao sistema fixo  $(x, y, z)$  variam no tempo conforme

$$\frac{d\vec{i}}{dt} = \vec{\Omega} \times \vec{i}, \quad \frac{d\vec{j}}{dt} = \vec{\Omega} \times \vec{j}, \quad \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{\Omega} \times \vec{k}. \quad (2.12)$$

Um vetor  $\vec{r}$  que rotaciona no espaço, pode ser escrito em termos das coordenadas do sistema fixo  $(x, y, z)$  da forma

$$\vec{r} = r_x \vec{i} + r_y \vec{j} + r_z \vec{k}. \quad (2.13)$$

A derivada de  $\vec{r}$  no tempo, em relação ao sistema  $(x', y', z')$ , é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}}{dt} &= \vec{i} \frac{dr_x}{dt} + r_x \frac{d\vec{i}}{dt} + \vec{j} \frac{dr_y}{dt} + r_y \frac{d\vec{j}}{dt} + \vec{k} \frac{dr_z}{dt} + r_z \frac{d\vec{k}}{dt} \\ &= \hat{i} \frac{dr_x}{dt} + \hat{j} \frac{dr_y}{dt} + \hat{k} \frac{dr_z}{dt} + \Omega \times (\vec{i} r_x + \vec{j} r_y + \vec{k} r_z) \\ &= \frac{\delta \vec{r}}{\delta t} + \Omega \times \vec{r}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

em que o termo  $\delta \vec{r} / \delta t$  representa a taxa de variação da mudança de  $\vec{r}$  em relação ao sistema fixo.

A partir do resultado obtido em (2.14), pode-se reescrever a equação (2.11) em relação a um referencial girante, fazendo a troca de  $\vec{r}$  por  $\vec{\mu}$ , de modo que

$$\frac{\delta \vec{\mu}}{\delta t} + \vec{\Omega} \times \vec{\mu} = \vec{\mu} \times \gamma \vec{B}, \quad (2.15)$$

ou

$$\frac{\delta \vec{\mu}}{\delta t} = \vec{\mu} \times \gamma \left( \vec{B} + \frac{\vec{\Omega}}{\gamma} \right). \quad (2.16)$$

Esta equação descreve o movimento de  $\vec{\mu}$  no sistema de coordenadas girante. Nota-se que, neste caso, é possível fazer uma escolha adequada para  $\vec{\Omega}$ , de modo que  $\vec{\mu}$  encontra-se em repouso neste sistema. Para isso, identifica-se o termo entre parênteses como sendo o campo efetivo

$$\vec{B}_{ef} = \vec{B} + \frac{\vec{\Omega}}{\gamma}. \quad (2.17)$$

Se o momento magnético  $\vec{\mu}$  está sob efeito de um campo magnético estático  $\vec{B} = \hat{k} B_0$ , então a escolha para  $\vec{\Omega}$  que permite descrever  $\vec{\mu}$  estando em repouso no referencial girante, é dada por

$$\vec{\Omega} = -\gamma B_0 \vec{k}. \quad (2.18)$$

Esta escolha faz com que o campo efetivo seja nulo e, conseqüentemente,

$$\frac{\delta \vec{\mu}}{\delta t} = 0. \quad (2.19)$$

Portanto neste sistema de referencial,  $\vec{\mu}$  é estacionário.

A ideia do referencial girante também pode ser utilizada na descrição de sistemas quânticos, como por exemplo, na interação do *spin* com um campo magnético. Neste caso, o Hamiltoniano (2.8) representa o sistema em um referencial de laboratório, por isso este Hamiltoniano será denotado por  $\hat{\mathcal{H}}_{RL}$ . Para realizar a transformação do referencial de laboratório para o girante, é utilizado o seguinte operador (28):

$$\hat{U} = e^{-i\omega_0 \hat{I}_z t}. \quad (2.20)$$

Este operador representa uma rotação em torno do eixo  $z$ . De tal maneira que o Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}_{RL}$  pode ser descrito pelo Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}_{RG}$  no referencial girante, através da transformação

$$\hat{\mathcal{H}}_{RG} = \hat{U} \hat{\mathcal{H}}_{RL} \hat{U}^\dagger. \quad (2.21)$$

Portanto, é necessário calcular as transformações dos operadores de momento angular que compõem o Hamiltoniano (2.8), de modo que

$$\hat{U} \hat{I}_z \hat{U}^\dagger = \hat{I}_z \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}_z,$$

Uma vez que  $\hat{I}_z$  comuta com  $\hat{U}$ . Para saber como ficam as transformações das outras componentes, é preciso admitir que (28)

$$\hat{U} \hat{I}_x \hat{U}^\dagger = e^{-i\hat{I}_z \phi} \hat{I}_x e^{i\hat{I}_z \phi} = \hat{f}(\phi), \quad (2.22)$$

onde  $\phi$  é um parâmetro adimensional e  $\hat{f}(\phi)$  é o operador que representa a transformação da componente  $x$  do momento angular. Derivando (2.21) em relação a  $\phi$ , tem-se

$$\frac{d\hat{f}(\phi)}{d\phi} = i\hat{I}_z \hat{U} \hat{I}_x \hat{U}^\dagger + \hat{U} \frac{d\hat{I}_x}{d\phi} \hat{U}^\dagger - i\hat{U} \hat{I}_x \hat{U}^\dagger \hat{I}_z. \quad (2.23)$$

Pelo fato do operador  $\hat{I}_x$  não depender de  $\phi$ , sua derivada é nula. Assim, (2.23) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{f}(\phi)}{d\phi} &= i\hat{U} \hat{I}_z \hat{I}_x \hat{U}^\dagger - i\hat{U} \hat{I}_x \hat{I}_z \hat{U}^\dagger \\ &= i\hat{U} (\hat{I}_z \hat{I}_x - \hat{I}_x \hat{I}_z) \hat{U}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Utilizando as relações de comutação entre os operadores de momento angular, dadas por

(21–23)

$$\begin{aligned}
[\hat{I}_x, \hat{I}_y] &= i\hat{I}_z, \\
[\hat{I}_y, \hat{I}_z] &= i\hat{I}_x, \\
[\hat{I}_z, \hat{I}_x] &= i\hat{I}_y,
\end{aligned} \tag{2.25}$$

a equação (2.24) fica

$$\frac{d\hat{f}(\phi)}{d\phi} = \hat{U}\hat{I}_y\hat{U}^\dagger. \tag{2.26}$$

Derivando (2.26) em relação a  $\phi$ , tem-se

$$\frac{d^2\hat{f}(\phi)}{d\phi^2} = -\hat{U}\hat{I}_x\hat{U}^\dagger, \tag{2.27}$$

que de acordo com (2.22), obtém-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d^2\hat{f}(\phi)}{d\phi^2} + \hat{f}(\phi) = 0. \tag{2.28}$$

A equação (2.28) é uma equação diferencial de segunda ordem homogênea (24), cuja a solução geral é dada por

$$\hat{f}(\phi) = \hat{A}\cos(\phi) + \hat{B}\sin(\phi). \tag{2.29}$$

Pelas equações (2.22) e (2.26), têm-se que  $\hat{f}(0) = \hat{I}_x = \hat{A}$  e  $\frac{d\hat{f}(0)}{d\phi} = -\hat{I}_y = \hat{B}$ . Portanto, o operador  $\hat{f}(\phi)$ , fica dado por

$$\hat{f}(\phi) = \hat{U}\hat{I}_x\hat{U}^\dagger = \hat{I}_x\cos(\phi) - \hat{I}_y\sin(\phi). \tag{2.30}$$

Procedendo de maneira análoga para a transformação do operador  $\hat{I}_y$ , obtém-se o seguinte resultado:

$$\hat{U}\hat{I}_y\hat{U}^\dagger = -\hat{I}_x\sin(\phi) + \hat{I}_y\cos(\phi). \tag{2.31}$$

Assim, as transformação das três componentes do momento angular ficam dadas por (28)

$$e^{-i\hat{I}_z\phi}\hat{I}_xe^{i\hat{I}_z\phi} = \hat{U}\hat{I}_x\hat{U}^\dagger = \hat{I}_x\cos(\phi) + \hat{I}_y\sin(\phi), \tag{2.32}$$

$$e^{-i\hat{I}_z\phi}\hat{I}_ye^{i\hat{I}_z\phi} = \hat{U}\hat{I}_y\hat{U}^\dagger = -\hat{I}_x\sin(\phi) + \hat{I}_y\cos(\phi), \tag{2.33}$$

$$e^{-i\hat{I}_z\phi}\hat{I}_ze^{i\hat{I}_z\phi} = \hat{U}\hat{I}_z\hat{U}^\dagger = \hat{I}_z. \tag{2.34}$$

De modo que a partir dessas relações, o operador Hamiltoniano (2.8), torna-se

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hbar e^{-i(\omega_{rf}t+\phi)\hat{I}_z}(\omega_0\hat{I}_z + \omega_1\hat{I}_x)e^{i(\omega_{rf}t+\phi)\hat{I}_z}. \tag{2.35}$$

Definindo-se um novo *ket*, dado por

$$|\psi'\rangle = e^{i(\omega_{rf}t+\phi)\hat{I}_z} |\psi\rangle, \quad (2.36)$$

obtém-se a seguinte relação:

$$-i\hbar e^{i(\omega_{rf}t+\phi)\hat{I}_z} \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hbar\omega_{rf}\hat{I}_z |\psi'\rangle - i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t}. \quad (2.37)$$

A partir da relação (2.37), a equação de Schrödinger para o estado  $|\psi'\rangle$  fica escrita na forma

$$-i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = -\hbar[(\omega_{rf} + \omega_0)\hat{I}_z + \omega_1\hat{I}_x] |\psi'\rangle \quad (2.38)$$

em que identifica-se o Hamiltoniano independente do tempo na forma que segue

$$\hat{\mathcal{H}}_{RG} = -\hbar[(\omega_{rf} + \omega_0)\hat{I}_z + \omega_1\hat{I}_x]. \quad (2.39)$$

Observa-se neste caso que dependência temporal do Hamiltoniano desapareceu. De fato, a equação (2.39) pode ser interpretada como a descrição do movimento de um núcleo cujo o momento magnético interage com um campo magnético efetivo (2). Para o caso em que  $\omega_{rf} = -\omega_0$ , a dinâmica do estado descrita por (2.38), fica dada por

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-i\omega_1\hat{I}_x t} |\psi'(0)\rangle, \quad (2.40)$$

em que  $e^{-i\omega_1\hat{I}_x t}$  provoca uma rotação em  $|\psi'(0)\rangle$  em torno do eixo  $x$ .

No caso em que  $\omega_0 \neq \omega_{rf}$ , o *spin* praticamente não é afetado pelo campo de rádio frequência, uma vez que  $\omega_0 \gg \omega_{rf}$  (2, 8, 36). Entretanto, se  $\omega_0 = -\omega_{rf}$  o sistema entra em ressonância, de modo que o *spin* se alinha ao campo de rádio frequência  $B_1$ . Esta característica justifica o nome de Ressonância Magnética Nuclear.

## 2.3 Variação da Magnetização

Define-se a magnetização  $\vec{M}$  de um material como a soma vetorial de todos os momentos magnéticos por unidade de volume (28). Se houver  $N$  átomos em um dado volume e a média dos momentos forem  $\langle \vec{\mu} \rangle$ , então  $\vec{M}$  pode ser escrito como

$$\vec{M} = N \langle \vec{\mu} \rangle. \quad (2.41)$$

Esse momento magnético está sujeito à agitação térmica e a flutuações do campo magnético local, devido aos momentos magnéticos dos seus vizinhos, de modo que a magnetização total do sistema sofre alterações durante a dinâmica. Félix Bloch (38) propôs um modelo fenomenológico que descrever a dinâmica de relaxação magnética do sistema.

Sabe-se que, após uma aplicação de um pulso de rádio frequência de  $\pi/2$ , o sistema terá uma magnetização resultante sobre o plano  $(x, y)$ . A partir do momento em que o pulso de rádio frequência é desativado, o sistema encontra-se fora do equilíbrio. Contudo, o sistema após um certo intervalo de tempo, deverá voltar ao seu estado de equilíbrio, o qual se encontra próximo a direção  $z$ .

No processo de relaxação, acontecem dois fenômenos: a relaxação transversal e a relaxação longitudinal. A relaxação transversal está relacionada ao desaparecimento das componentes de magnetização ao longo dos eixo  $x$  e  $y$ , que ocorre após a aplicação do pulso de rádio frequência, este tipo de relaxação também é chamado de relaxação *spin-spin* (8,36). Pode-se dizer que esta relaxação é causada pela heterogeneidade do campo magnético estático e pelo campo criado pelo próprio *spin* nuclear no sítio de outros núcleos. A relaxação longitudinal também é chamada de relaxação *spin-rede*, devido ao fato de que esta relaxação está associada à perda de energia do sistema para o ambiente, que normalmente é chamado de rede.

As equações diferenciais fenomenológicas, que descrevem o processo de relaxação transversal, são dadas por (8,36)

$$\frac{dM_x}{dt} = -\frac{M_x}{T_2}, \quad \frac{dM_y}{dt} = -\frac{M_y}{T_2}, \quad (2.42)$$

em que  $T_2$  é conhecido como tempo de relaxação transversal. As soluções de (2.42) são

$$M_x = M_0 e^{-t/T_2} \quad M_y = M_0 e^{-t/T_2}, \quad (2.43)$$

onde  $M_0$  é o valor da magnetização inicial.

O processo de relaxação longitudinal é descrito pela equação diferencial fenomenológica

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{M_0 - M_z}{T_1}, \quad (2.44)$$

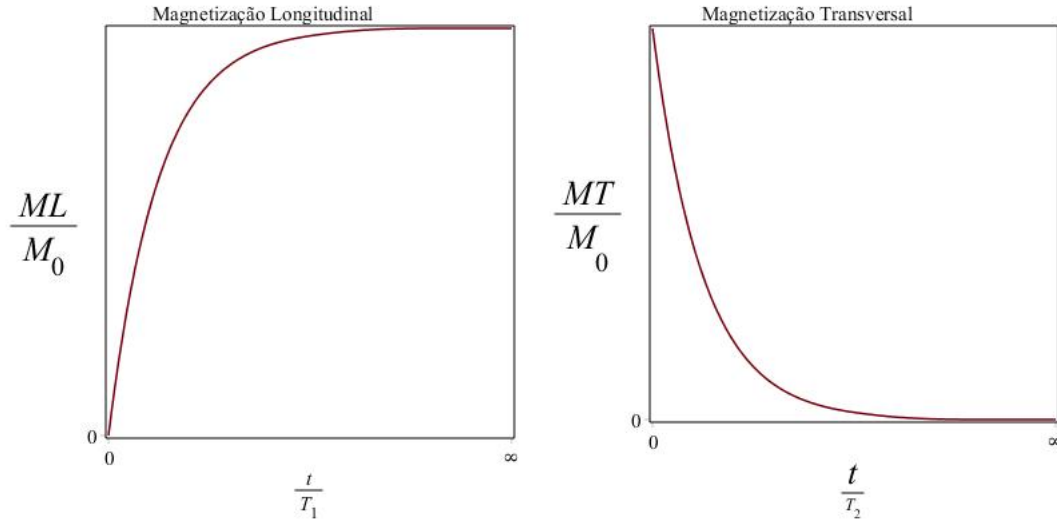
em que  $T_1$  é chamado de tempo de relaxação longitudinal, cuja a solução é

$$M_z = M_0(1 - e^{-t/T_1}). \quad (2.45)$$

A figura (2.4) ilustra a evolução temporal das magnetizações, transversal e longitudinal, dadas pelas equações (2.43) e (2.45).



Figura 2.4: Magnetização em um sistema de Ressonância Magnética Nuclear. A figura (a) representa a magnetização transversal (2.43) após o pulso de rádio frequência sobre o plano  $(x, y)$ . A figura (b) representar a magnetização longitudinal (2.45) após o pulso de rádio frequência ao longo do eixo  $z$ . Após um intervalo de tempo a magnetização em  $(x, y)$  desaparecem, e magnetização em  $z$  vai para a magnetização de equilíbrio  $M_0$



Fonte: O autor

O uso dos conceitos apresentados neste capítulo, será de grande utilidade para a realização de computação quântica adiabática e não adiabática. As quais serão apresentadas com o intuito realizar o algoritmo de busca desenvolvido por Grover.

## Capítulo 3

# Invariantes Dinâmicos

Neste capítulo, aborda-se o conceito de Invariante Dinâmico, tanto no contexto clássico como no quântico. Em ambos os contextos, o conceito de Invariante Dinâmico está associado à grandezas físicas que são conservadas, o que permite simplificar a solução da dinâmica de um sistema físico.

### 3.1 Contexto Clássico

Uma forma mais prática de encontrar soluções para as equações de movimento em Mecânica Clássica, é feita através do estudo dos Invariantes Dinâmicos. Assim, quando tenta-se determinar como cada partícula do sistema se movimenta em cada instante de tempo, a existência de quantidades conservadas é extremamente útil. Por exemplo, a conservação da energia mecânica proporciona muitas informações da dinâmica de um sistema, mesmo sem saber os detalhes do movimento. Pois, embora não seja possível determinar a posição de cada partícula em cada instante de tempo, o conhecimento de quantidades conservadas pode levar a uma descrição completa da dinâmica. Essas quantidades conservadas são conhecidas como Constantes de Movimento, Invariantes Dinâmicos ou também Integrais de Movimento.

O tratamento feito a seguir, está relacionado à formulação Lagrangiana da Mecânica Clássica (11, 16, 17). Na formulação Lagrangiana para um sistema de forças conservativas, as energias cinética e potencial têm o papel central, diferente da formulação Newtoniana em que a força ocupa este papel. Neste contexto, a função de Lagrange é expressa em termos da energia, a qual é invariante perante uma transformação de coordenadas, permitindo utilizar o conceito de coordenadas generalizadas (11, 16, 17)

Por definição, uma constante de movimento é uma função das coordenadas generalizadas  $q_n(t)$ , das velocidades generalizadas  $\dot{q}_n(t)$  e do tempo  $t$  (11), isto é,

$$F(q_1(t), \dots, q_n(t), \dot{q}_1(t), \dots, \dot{q}_n(t), t) = \text{constante}, \quad (3.1)$$

de modo que

$$\frac{dF}{dt} = 0. \quad (3.2)$$

Para ilustrar este conceito, utiliza-se como exemplo o Oscilador Harmônico Simples, cuja a dinâmica é descrita por

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0, \quad (3.3)$$

em que  $x$  representa a posição e  $\omega$  a frequência de oscilação. De acordo com (11), a constante de movimento para o OHS é dada por

$$F(x(t), \dot{x}(t), t) = \arctan\left(\frac{\omega x(t)}{\dot{x}(t)}\right) - \omega t. \quad (3.4)$$

Derivando esta função em relação ao tempo e aplicando a regra da cadeia, tem-se

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \ddot{x} + \frac{\partial F}{\partial t}, \quad (3.5)$$

o que resulta em

$$\frac{dF}{dt} = \left( \frac{1}{1 + \frac{\omega^2 x^2}{\dot{x}^2}} \frac{\omega}{x} \right) \dot{x} - \frac{1}{1 + \frac{\omega^2 x^2}{\dot{x}^2}} \left( \frac{\omega x}{\dot{x}^2} \right) \ddot{x} - \omega. \quad (3.6)$$

Utilizando (3.3), tem-se que

$$\ddot{x}(t) = -\omega^2 x, \quad (3.7)$$

e substituindo (3.7) em (3.6), verifica-se que

$$\frac{dF}{dt} = 0,$$

o que mostra que a função  $F(x(t), \dot{x}(t), t)$  é uma constante de movimento para o oscilador harmônico simples.

Uma forma de identificar as constantes de movimento para um sistema físico, é feita através da equação de Euler-Lagrange (16, 17)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (3.8)$$

a partir da qual, define-se o momento conjugado à uma dada coordenada, como sendo a derivada da Lagrangiana em relação a uma velocidade generalizada

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i. \quad (3.9)$$

Além disso, define-se uma coordenada cíclica  $q_i$ , se a Lagrangiana não depender dessa

coordenada. O nome cíclica que é dado a esse tipo de coordenada, deve-se ao fato de que ela aparece tipicamente associada a coordenadas angulares (11). Isto está expresso no seguinte teorema:

Teorema: se a coordenada  $q_i$  de uma Lagrangiana é dita cíclica, então seu momento conjugado  $p_i$  é uma constante de movimento, de modo que a equação (3.8), torna-se

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0, \quad (3.10)$$

e, portanto,

$$p_i = \text{constante}. \quad (3.11)$$

Outra maneira de representar os invariantes dinâmicos é através das equações de Hamilton (16, 17), onde a função associada ao invariante  $F(q, p, t)$  está relacionada às variáveis canônicas  $q$  e  $p$ , de modo que, sua derivada em relação ao tempo é nula

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial \dot{p}_i} \dot{p}_i + \frac{\partial F}{\partial t} = 0. \quad (3.12)$$

As equações de Hamilton são dadas por

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad (3.13)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad (3.14)$$

as quais podem ser substituídas em (3.12), de tal forma que

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial \dot{p}_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \frac{\partial F}{\partial t} = 0. \quad (3.15)$$

Onde identifica-se a estrutura do parênteses de Poisson, o qual é dado por

$$\{F, \mathcal{H}\} = \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial \dot{p}_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad (3.16)$$

e, portanto, obtém-se a seguinte relação:

$$\frac{\partial I_n}{\partial t} + \{I_n, \mathcal{H}\} = 0. \quad (3.17)$$

Em que utilizou-se  $F = I_n$  para enfatizar que a função está relacionada a um Invariante Dinâmico.

Através do Parênteses de Poisson é possível associar uma variável canônica do sistema clássico a um operador que atua no espaço de Hilbert, este processo é conhecido como

quantização canônica (21), onde é feita a substituição de  $\{I_n(t), \mathcal{H}(t)\} \mapsto \frac{i}{\hbar}[\hat{I}_n(t), \hat{\mathcal{H}}(t)]$ , sendo  $\hat{I}_n(t)$  e  $\hat{\mathcal{H}}(t)$  operadores.

### 3.2 Invariantes Dinâmicos no contexto quântico

A importância dos Invariantes Dinâmicos no contexto deste trabalho está no fato de que eles podem ser utilizados como atalho para implementação de protocolos de computação quântica (7, 39).

Supondo que o Hamiltoniano do sistema depende explicitamente do tempo, e utilizando o processo de quantização canônica, a equação (3.17) em unidades de ( $\hbar = 1$ ), fica dada por

$$\frac{\partial \hat{I}_n(t)}{\partial t} - i[\hat{I}_n(t), \hat{\mathcal{H}}(t)] = 0. \quad (3.18)$$

Esse tipo de formalismo foi desenvolvido por Lewis (40). Lewis encontrou um invariante não adiabático para o oscilador harmônico quântico através da regra de quantização canônica

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i,$$

verificando que o invariante deveria obedecer a equação (3.18). Entretanto, havia dificuldade em utilizar este formalismo, pois ainda não se sabia como encontrar o invariante quântico para o sistema em questão. Foi com o trabalho de Lewis e Reisenfeld (41) que problemas em Mecânica Quântica, nos quais a equação de Schrödinger apresenta uma dependência temporal no Hamiltoniano, puderam ser resolvidos.

A evolução temporal de um estado quântico associado a um sistema no qual o Hamiltoniano depende explicitamente do tempo, é descrita pela equação de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (3.19)$$

O operador invariante associado ao sistema deve ser hermitiano e possuir um conjunto completo de auto-estados,

$$\hat{I}_n(t) = \sum_j \lambda_j |\phi_j(t)\rangle \langle \phi_j(t)|, \quad (3.20)$$

em que  $\lambda_j$  é o auto-valor associado ao auto-vetor  $|\phi_j(t)\rangle$ . Uma propriedade importante do invariante é que seus auto-valores não mudam com o tempo, logo, a taxa de variação do valor esperado do operador invariante deve ser nula, de modo que

$$\frac{d \langle \hat{I}(t) \rangle}{dt} = 0. \quad (3.21)$$

Expandindo a solução da equação de Schrödinger (3.19) na base de auto-estado dos invariante  $\hat{I}(t)$ , tem-se

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t) |\phi_j(t)\rangle, \quad (3.22)$$

assim, a equação (3.19) toma a forma

$$\sum_j \frac{d(c_j(t) |\phi_j(t)\rangle)}{dt} = \sum_j -i\hat{\mathcal{H}}(t)c_j(t) |\phi_j(t)\rangle, \quad (3.23)$$

derivando a equação (3.23) e fazendo a multiplicação de  $\langle\phi_j(t)|$ , obtém-se

$$\sum_j (\dot{c}_j(t) + c_j(t) \langle\phi_j(t)| \frac{d}{dt} |\phi_j(t)\rangle) = \sum_j -ic_j(t) \langle\phi_j(t)| \hat{\mathcal{H}}(t) |\phi_j(t)\rangle, \quad (3.24)$$

em seguida, integrando a equação (3.24) no tempo

$$c_j(t) = c_j(0) e^{-\int_0^t dt (\langle\phi_j(t)| d/dt |\phi_j(t)\rangle) + i\langle\phi_j(t)| \hat{\mathcal{H}}(t) |\phi_j(t)\rangle}. \quad (3.25)$$

O argumento da exponencial na equação (3.25) está de acordo com o resultado obtido no capítulo 1, em que os termos correspondem aos fatores de fase dinâmico e geométrico.

Como o objetivo do trabalho é fazer uma comparação da eficiência entre a computação quântica adiabática e a não adiabática, faz-se necessário uma reparametrização do tempo de evolução do sistema, no sentido de fazer com que o tempo de evolução em ambos os casos seja o mesmo, fazendo  $\tau = t/T_{ad}$  onde  $T_{ad}$  tempo de evolução adiabática, de modo que a equação de movimento (3.18), fica dada por

$$\frac{\partial \hat{I}_n(t)}{\partial \tau} - iT_{ad}[\hat{I}(\tau), \hat{\mathcal{H}}(\tau)] = 0. \quad (3.26)$$

A equação (3.26), será usada para a obtenção do invariante em um sistema de Ressonância Magnética Nuclear. Isso permitirá obter o resultado para a dinâmica do sistema, na qual será usada para a realização de protocolos de computação quântica.

## Capítulo 4

# Computação Quântica

Neste capítulo, apresenta-se os conceitos para a realização de algoritmos de computação quântica (1,2,8). De início, introduz-se ferramentas matemáticas necessárias para a realização dos algoritmos e, em seguida, é feita a construção dos algoritmos: Deutsch e Grover.

### 4.1 Produto Direto

O produto direto é uma operação matemática que permite incorporar diferentes espaços de Hilbert em uma única descrição (22), este também é chamado de produto tensorial ou produto de Kronecker. Por exemplo, um sistema quântico composto por duas partículas de spin 1/2. Uma das partículas está associada ao espaço de Hilbert  $\mathbb{H}_1$ , enquanto a outra está associada ao espaço de Hilbert  $\mathbb{H}_2$ . Pode-se associar ambas as partículas a um único espaço de Hilbert  $\mathbb{H}$ , o qual é dado pela composição do espaço  $\mathbb{H}_1$  e  $\mathbb{H}_2$  por meio do produto direto:  $\mathbb{H} = \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2$ .

Considerando dois vetores  $|a\rangle$  e  $|b\rangle$ , o produto direto entre eles pode ser representado por

$$|a\rangle \otimes |b\rangle = |a\rangle |b\rangle = |ab\rangle. \quad (4.1)$$

Assim, a representação dos vetores da base computacional  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , fica dada por

$$|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Dado um operador  $\hat{A}^1$  que atua no espaço de Hilbert  $\mathbb{H}_1$  e um operador  $\hat{B}^2$  que atua no espaço de Hilbert  $\mathbb{H}_2$ , pode-se compor um operador  $\hat{A}^1 \otimes \hat{B}^2$  que atua em um espaço de Hilbert  $\mathbb{H} = \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2$ . Supondo que ambos os operadores sejam representados por

matrizes  $2 \times 2$ , tem-se

$$\hat{A}^1 \otimes \hat{B}^2 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}\hat{B}^2 & a_{12}\hat{B}^2 \\ a_{21}\hat{B}^2 & a_{22}\hat{B}^2 \end{bmatrix}, \quad (4.2)$$

$$\hat{A}^1 \otimes \hat{B}^2 = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{bmatrix}. \quad (4.3)$$

## 4.2 Computação Clássica e Quântica

A computação quântica é um estudo realizado sobre o processamento de informação contida em sistemas quânticos (1). A computação clássica deve ser construída a partir de circuitos elétricos, fios e portas lógicas clássicas. Logo, a computação quântica também deverá obedecer esse padrão, levando informação de um lado para outro através das leis que regem o sistema quântico.

Na computação clássica, as portas lógicas que processam a informação do sistema é feita através de *bits* clássicos denotados por 0 ou 1. Na computação quântica, usá-se um conceito análogo chamado de *q-bit*<sup>1</sup>, o qual será tratado como um objeto puramente matemático. Dessa forma, isso permite fazer um tratamento geral que não dependerá de nenhum sistema físico para sua implementação. Um *q-bit* é representado por

$$|\psi_0\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

em que  $\alpha$  e  $\beta$  são números complexos e o conjunto  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  são vetores ortonormais, os quais formam a base computacional. No contexto de RMN,  $|0\rangle$  representa *spin* para cima e  $|1\rangle$  *spin* para baixo, enquanto  $\alpha$  e  $\beta$  representam as amplitudes de probabilidade associadas a estes vetores, respectivamente. Tais amplitudes satisfazem a seguinte relação:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

o que garante a normalização do estado.

## 4.3 Paralelismo

Paralelismo quântico, conforme a referência (1), é uma característica fundamental de muitos algoritmos quânticos. Ele permite que seja possível avaliar funções  $f(x)$  para muitos valores de  $x$  simultaneamente.

---

<sup>1</sup>A tradução do *q-bit* foi feito pelo prof. Dr. Luiz Davidovich, segundo (1)



Para a realização desse protocolo, será necessário o uso de um operador de transformação unitária  $\hat{U}_f$ , que realiza o mapeamento de  $|x, y\rangle \longrightarrow |x, y \oplus f(x)\rangle$ , em que  $x$  é o  $q$ -bit de controle,  $y$  é o  $q$ -bit alvo e  $\oplus$  indica soma de módulo 2. A aplicação desta operação sobre a base computacional, é dada por

$$\hat{U}_f |00\rangle = |0, 0 \oplus f(0)\rangle ,$$

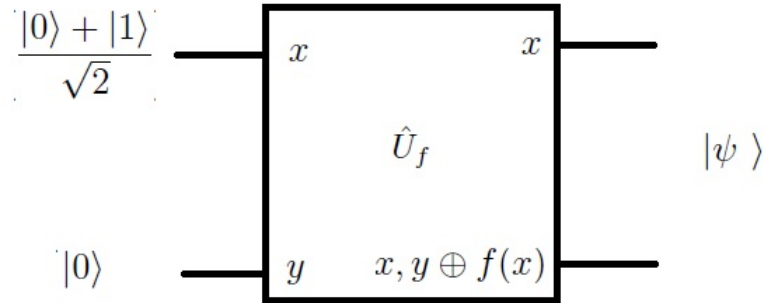
$$\hat{U}_f |01\rangle = |0, 1 \oplus f(0)\rangle ,$$

$$\hat{U}_f |10\rangle = |1, 0 \oplus f(1)\rangle ,$$

$$\hat{U}_f |11\rangle = |1, 1 \oplus f(1)\rangle .$$

Nota-se que, se  $y = f(x)$ , então  $|x, y \oplus f(x)\rangle = |x, 0\rangle$  e, se  $y \neq f(x)$ , então  $|x, y \oplus f(x)\rangle = |x, 1\rangle$ .

Figura 4.1: Representação de um circuito quântico que avalia  $f(0)$  e  $f(1)$  simultaneamente. O  $q$ -bit de controle  $x$  entra em um estado de superposição  $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$  e o  $q$ bit alvo  $y$  entra em um estado  $|0\rangle$ , o operador de transformação  $\hat{U}_f$  atua no sistema, o que resulta em  $|\psi\rangle$ .



Fonte: O autor

Observa-se na figura (4.1) que o primeiro registro de controle  $x$  é preparado em uma superposição  $\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ , assim quando o operador  $\hat{U}_f$  atua sobre esse registro ele nos fornece

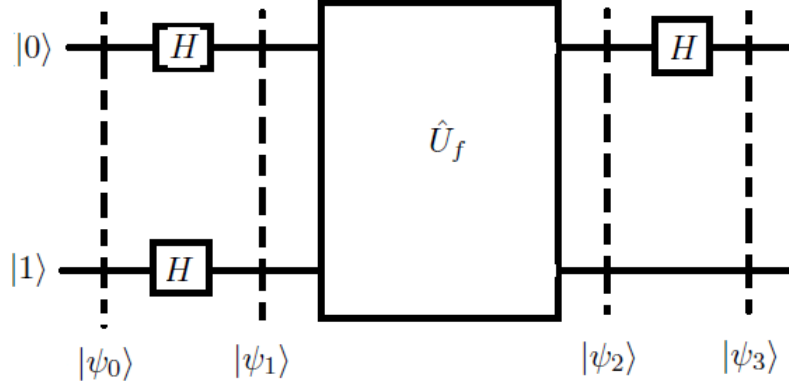
$$\hat{U}_f \left( \frac{|0, 0\rangle + |1, 0\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \frac{|0, f(0)\rangle + |1, f(1)\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.4)$$

Nota-se que este estado contém informação sobre ambos os valores de  $f(x)$  simultaneamente, a este tipo de efeito dá-se o nome de paralelismo quântico.

## 4.4 Algoritmo de Deutsch

O algoritmo de Deutsch pode ser usado para identificar uma função binária, de modo a saber se ela é constante ( $f(0) = f(1)$ ) ou equilibrada ( $f(0) \neq f(1)$ ), realizando apenas uma medida.

Figura 4.2: Representação do Circuito Quântico para implementar o algoritmo de Deutsch.



Fonte: O autor

Para a realização do algoritmo conforme a figura (4.2), é necessário iniciar com um estado  $|\psi_0\rangle = |01\rangle$ , sobre o qual aplica-se uma porta Hadamard (1,2), que é dada por

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

A aplicação da porta Hadamard transforma cada um dos  $q$ -bits em uma superposição, de modo que o estado  $|\psi_0\rangle$  fica na forma

$$|\psi_1\rangle = (H \otimes H) |\psi_0\rangle = (H \otimes H) |01\rangle, \quad (4.6)$$

em que  $|01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$ , resultando em

$$|\psi_1\rangle = \left[ \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \otimes \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right]. \quad (4.7)$$

Tem-se que  $\hat{U}_f |x, y\rangle = |x, y \oplus f(x)\rangle$ , de modo que a aplicação da transformação  $\hat{U}_f$  no estado  $|\psi_1\rangle$ , fica dado por

$$|\psi_2\rangle = \begin{cases} \pm \left[ \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] & \text{se } f(0) = f(1) \\ \pm \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] & \text{se } f(0) \neq f(1). \end{cases} \quad (4.8)$$

Para finalizar, aplica-se um porta Hadamard sobre o primeiro  $q$ -bit, de tal forma que ele saia do estado de superposição, ou seja,

$$|\psi_3\rangle = \begin{cases} \pm |0\rangle \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] & \text{se } f(0) = f(1) \\ \pm |1\rangle \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] & \text{se } f(0) \neq f(1). \end{cases} \quad (4.9)$$

Assim, observa-se que  $f(0) \oplus f(1)$  é 0 se  $f(0) = f(1)$ , caso contrário é 1. De modo geral, o resultado pode ser escrito como

$$|\psi_3\rangle = \pm |f(0) \oplus f(1)\rangle \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right]. \quad (4.10)$$

Portanto, este resultado expressa uma propriedade global de  $f(x)$ , a qual está contida no primeiro  $q$ -bit do sistema. Isso mostra que o algoritmo quântico é mais eficiente em relação ao algoritmo clássico. Esta característica é de grande motivação para o estudo e desenvolvimento de computadores quânticos.

Em um sistema clássico por exemplo, no qual tem-se a probabilidade de 50% de encontrar  $f(0)$  e 50% de encontrar  $f(1)$ , sendo elas mutualmente excludentes, é necessário realizar duas medidas para saber os valores de  $f(x)$ . Enquanto neste algoritmo quântico a medida de uma função interfere diretamente na outra. De tal maneira que é necessária uma única medida. O algoritmo de Deutsch está contido em um algoritmo mais geral, chamado de Algoritmo de Deutsch-Jozsa (1), o qual mostra que para um sistema de  $n$   $q$ -bits isso também é válido.

## 4.5 Algoritmo de Busca (Grover)

O algoritmo de busca tem por finalidade encontrar um elemento  $x$  em uma lista  $L$  que não está ordenada, como por exemplo, um mapa onde existe um número considerável de cidades e deseja-se encontrar o menor caminho entre elas. Em 1996, Grover divulgou um algoritmo que tem a capacidade de realizar este tipo de procedimento de forma mais eficiente que os seus análogos clássicos. Os algoritmos clássicos para resolver um problema de busca com  $N$  elementos, necessita de uma quantidade  $\mathcal{O}(N)$  de operações. De forma surpreendente, o algoritmo quântico desenvolvido por Grover necessita apenas de  $\mathcal{O}(\sqrt{N})$  operações (2, 9, 42).

Para realização da descrição do algoritmo, é necessário usar a ideia de um oráculo, que é no fundo uma "caixa preta" com a capacidade de reconhecer a solução do problema de busca. Este oráculo é representado por um operador unitário  $\hat{\mathcal{O}}$ , definido como

$$\hat{\mathcal{O}} |x\rangle |q\rangle = |x\rangle |q \oplus f(x)\rangle, \quad (4.11)$$

onde o  $q$ -bit  $|q\rangle$  será invertido se  $f(x) = 1$  e continuará o mesmo se  $f(x) = 0$ . Isto pode ser verificado, preparando o estado  $|x\rangle|0\rangle$  e, desse modo após a aplicação do oráculo, analisa-se o  $q$ -bit  $|q\rangle$  para descobrir se  $x$  é a solução desejada. Uma maneira de visualizar a ação do oráculo sobre o sistema, pode ser feita através da aplicação de  $\hat{\mathcal{O}}$  sobre os  $q$ -bits na forma  $|x\rangle(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ , de modo que

$$\hat{\mathcal{O}}|x\rangle\left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = (-1)^{f(x)}|x\rangle\left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right). \quad (4.12)$$

Dessa maneira, o  $q$ -bit  $|q\rangle$  não é alterado, então pode-se escrever

$$\hat{\mathcal{O}}|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle, \quad (4.13)$$

sendo assim, é como se o oráculo marcasse a solução do problema mudando a sua fase.

## 4.6 Rotina para gerar o operador de Grover

A rotina para gerar o operador de Grover possui 4 operações. A primeira operação é o oráculo. A segunda é a aplicação da porta Hadamard sobre todos os  $q$ -bits de registro  $|0\rangle^{\otimes n}$ . A terceira operação, consiste na aplicação de uma operação que inverte a fase de todos os estados, exceto para  $|0\rangle$ . A última consiste na aplicação da porta Hadamard sobre todos os  $q$ -bits novamente. Dessa forma, o operador de Grover pode ser representado como

$$\hat{\mathcal{O}} \longrightarrow H^{\otimes n} \longrightarrow 2|0\rangle\langle 0| - I \longrightarrow H^{\otimes n}, \quad (4.14)$$

assim, o operador de Grover fica dada por

$$\hat{G} = (2|\psi\rangle\langle\psi| - I)\hat{\mathcal{O}}. \quad (4.15)$$

O estado  $|\psi\rangle$  na equação (4.15) é devido a aplicação da porta Hadamard ao estado  $|0\rangle^{\otimes n}$ , colocando este estado em um estado de superposição na forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle. \quad (4.16)$$

A aplicação do operador  $(2|\psi\rangle\langle\psi| - I)$  em um estado  $\sum_k \alpha_k |k\rangle$ , resulta em

$$\begin{aligned} [2|\psi\rangle\langle\psi| - I] \sum_k \alpha_k |k\rangle &= \sum_k \left[ \frac{2}{N} \sum_{x=0}^{N-1} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle\langle x|k\rangle \alpha_k - \alpha_k |k\rangle \right] \\ &= \sum_k \left[ \frac{2}{N} \sum_{x=0}^{N-1} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \alpha_k \delta_{kx} - \alpha_k |k\rangle \right] \end{aligned}$$

$$[2|\psi\rangle\langle\psi| - I] \sum_k \alpha_k |k\rangle = \sum_k [2\langle\alpha\rangle - \alpha_k] |k\rangle. \quad (4.17)$$

Em que  $\langle\alpha\rangle \equiv \sum_k \alpha_k / N$  é o valor médio de  $\alpha_k$  e é denominado de inversão em torno da média.

Para o caso de um sistema de dois  $q$ -bits o estado de entrada do algoritmo é  $|00\rangle$ , sobre o qual aplica-se uma porta Hadamard criando um estado de superposição. Supondo que o estado procurado seja  $|00\rangle$ , então o oráculo deverá inverter a fase deste vetor, de modo que

$$|\psi_1\rangle = \hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle = \frac{1}{2}(-|00\rangle + |10\rangle + |01\rangle + |11\rangle). \quad (4.18)$$

Em seguida, o operador  $(2|\psi\rangle\langle\psi| - I)$  deverá ser aplicado, fornecendo o estado desejado

$$\hat{G}|\psi_1\rangle = |00\rangle. \quad (4.19)$$

Se for desejado encontrar outro estado da base computacional, basta apenas mudar o oráculo, de maneira que ele inverta a fase do estado procurado. A matriz do oráculo para o estado  $|00\rangle$  é dada por

$$\hat{\mathcal{O}} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.20)$$

e o operador que inverte a fase do sistema é

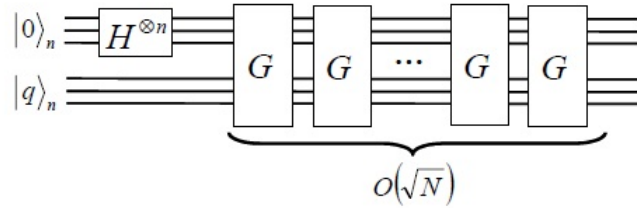
$$[2|\psi\rangle\langle\psi| - I] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

Assim, o operador de Grover  $\hat{G}$  da equação (4.19), fica expresso por

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

A forma de gerar essas portas usando pulsos de RMN pode ser encontrada em (1,2,36). A figura (4.3) ilustra o circuito para a realização do algoritmo de Grover. No qual o sistema inicia-se com todos os estados em  $|0\rangle^{\otimes n}$ , sobre os quais é aplicada uma porta Hadamard, seguida do operador de Grover  $\mathcal{O}\sqrt{N}$ , onde  $N$  é o número de elementos do sistema ( $N = 2^n$  e  $n$  é o número de  $q$ -bits do sistema).

Figura 4.3: Figura ilustra o circuito para a realização do algoritmo de Grover. No qual o sistema inicia-se com todos os estados em  $|0\rangle_n^{\otimes n}$ , sobre os quais é aplicada uma porta Hadamard, seguida do operador de Grover  $\mathcal{O}\sqrt{N}$ , onde  $N$  é o número de elementos do sistema ( $N = 2^n$  e  $n$  é o número de  $q$ -bits do sistema). O ket  $|q\rangle_n$  é o **q-bit** de controle relacionado ao oráculo

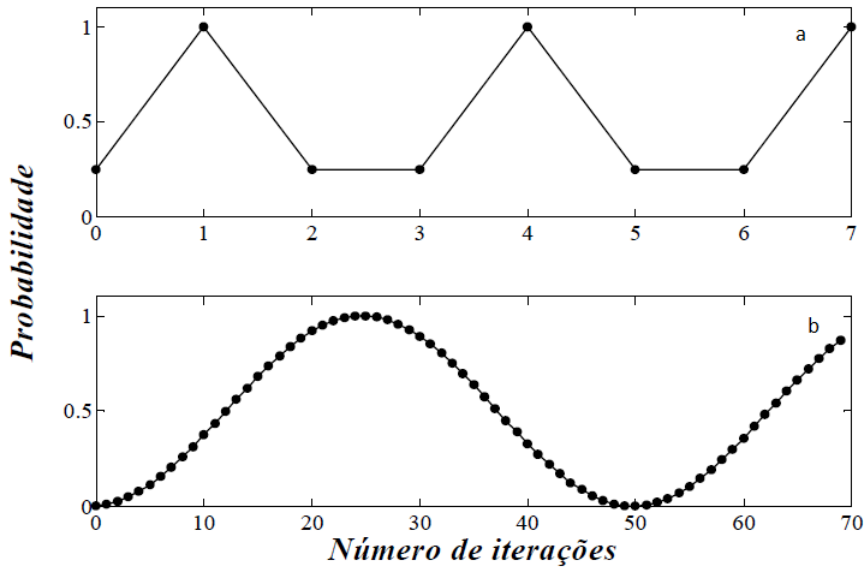


Fonte: Adaptado de (2)

O resultado da medida oscila com o número de vezes que o operador de Grover é aplicado e, portanto, existe um número correto de interações que devem ser realizadas para encontrar o elemento procurado. Este número é da ordem de  $\sqrt{N}$ .

A figura (4.4) ilustra as oscilações da aplicação do algoritmo de Grover, em que observa-se que se o número de aplicações ultrapassa  $\sqrt{N}$ , a probabilidade de encontrar o estado diminui, de modo que ele só volta a ter uma máxima probabilidade após novas aplicações.

Figura 4.4: A figura ilustra as oscilações da aplicação do algoritmo de Grover. Em que observa-se que se o número de aplicações ultrapassar  $\sqrt{N}$ , a probabilidade de encontrar o estado diminui, de modo que ele só volta a ter uma máxima probabilidade após novas aplicações. A figura (a) é para um sistema de 2  $q$ -bit. A figura (b) é para um sistema de 10  $q$ -bits.



Fonte: Adaptado de (2)

Neste capítulo apresentou-se as ideias para a realização dos algoritmos de computação quântica, as quais são realizadas através de transformações sobre o  $q$ -bits do sistema. Essas transformações são feitas através de portas lógicas, de modo que ao aplica-las aos  $q$ -bits de entrada transforma-os no resultado do algoritmo os  $q$ -bits de saída. A computação quântica adiabática e não adiabática, consiste em uma maneira de obter os resultados desses algoritmos sem a necessidade da aplicação das portas lógicas ao sistema, tornando o processo equivalente.

## Capítulo 5

# Computação Quântica Adiabática e Não adiabática

O teorema adiabático é útil para diversas aplicações em Física, uma vez que possibilita o controle dinâmico dos sistemas. Existem vários trabalhos que utilizam o teorema adiabático, por exemplo, o controle de canais de teleporte quântico (43), computação quântica adiabática sujeita a decoerência para sistemas abertos (44), indução de transição de fase quântica (45) e realização de computação quântica e transição de fase quântica para muitos corpos (46, 47). Neste capítulo, será apresentado a realização de computação quântica adiabática e não adiabática via Ressonância Magnética Nuclear. Entretanto, existem outras áreas experimentais nas quais é possível realiza-las, como *q-bits* supercondutores (48), armadilhas de íons (49, 50) e redes ópticas (51)

### 5.1 Computação Adiabática

A realização do protocolo de computação quântica utilizando o teorema adiabático, mais precisamente o algoritmo de Grover (1, 2, 9), fundamenta-se no resultado obtido no capítulo 1, dado por

$$\max_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \rangle}{g_{mn}(t)} \right| \ll \min_{0 \leq t \leq T} |g_{mn}(t)|,$$

a qual expressa a condição necessária para uma evolução adiabática, em que o limite de tempo para a evolução deve ser infinito, como mostra (1.46), garantindo o controle da evolução do sistema. Contudo, um tempo infinito não é realizável experimentalmente, de tal forma que é necessário buscar um tempo adequado para a realização do protocolo. A



chave para encontrar este tempo está na equação (1.32) (52), dada por

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \left\langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_m(t) \right\rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\left\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \right\rangle}{E_n(t) - E_m(t)} e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}.$$

Esta equação está relacionada a amplitude de probabilidade do sistema, em que o estado de evolução do sistema  $|\psi(t)\rangle = c_m(t) |\psi(0)\rangle e^{-i\theta(t)}$ , de modo que a condição adiabática anula o segundo termo da equação (1.32), mantendo o sistema no estado fundamental, adquirindo apenas uma fase. No sentido de encontrar um tempo realizável experimentalmente, garantindo a adiabaticidade, o segundo termo da equação de  $c_m(t)$  deve ser minimizado (7, 53), o qual manterá o estado  $|\psi(T)\rangle$  após a evolução o mais próximo do estado fundamental, de modo que permite escrever

$$|\langle E_0, T | \psi(T) \rangle|^2 = 1 - \epsilon^2, \quad (5.1)$$

em que (5.1) é a probabilidade do estado  $|\psi(T)\rangle$  ser o estado fundamental  $|E_0, T\rangle$  após uma evolução de tempo  $T$ , onde

$$\frac{\left\langle \phi_m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | \phi_n(t) \right\rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \propto \epsilon.$$

Em que  $\epsilon$  está relacionado ao erro do estado do sistema não ser o estado fundamental, para valores de  $\epsilon \ll 1$ , o sistema permanecerá no estado fundamental durante a evolução. Com ajuda dos argumentos discutidos acima, faz-se uso dos conceitos de computação quântica adiabática e os aplicaremos ao contexto do algoritmo de Grover.

No capítulo anterior, apresentou-se os conceitos para a realização de computação quântica. Em que mostrou-se que para a realização dos algoritmos era necessária a aplicação de operadores de transformação, os quais fornecem o resultado para o algoritmo. A computação quântica adiabática, é uma maneira realizar os algoritmos sem a necessidade de aplicar operações no sistema.

O algoritmo de Grover consiste em encontrar um elemento da base computacional, que no caso de dois  $q$ -bits é dada pelos elementos  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ . Para realizar computação adiabática, é necessário conhecer os estados de entrada e de saída do algoritmo sobre os quais será efetuada a evolução dinâmica do sistema. No caso do algoritmo de Grover apresentado no capítulo 4, estado de entrada é  $|00\rangle$  e o de saída  $|00\rangle$ . Isto possibilita obter o resultado do algoritmo sem a necessidade de aplicar portas lógicas.

O trabalho tem como objetivo, analisar a eficiência da computação quântica adiabática e não adiabática. Para isso escolha dos estados final e inicial para a evolução do sistema, foi feita devido ao Hamiltoniano de RMN utilizado para a realizar computação quântica não adiabática o qual será tratado mais adiante. Os estados escolhidos para a entrada e

saída são dados por

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle), \quad (5.2)$$

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \quad (5.3)$$

O estado expresso em (5.2) é um estado de superposição para um sistema de dois  $q$ -bits, o qual está um passo a frente do estado inicial do algoritmo de Grover, o qual é  $|00\rangle$ , enquanto o estado representado em (5.3) é um estado da base de Bell.

Para o caso em que busca-se o estado  $|00\rangle$ , conforme apresentado no capítulo 4, faz-se necessário a aplicação de uma porta CNOT e uma porta Hadamard (1) ao estado de Bell (5.5). A porta CNOT é dada por

$$CNOT = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

e a porta Hadamard

$$(H \otimes \hat{1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Estas portas, quando aplicadas ao estado de Bell (5.5), geram o resultado

$$(H \otimes \hat{1})CNOT|\psi_f\rangle = |00\rangle,$$

dessa forma a computação quântica adiabática e não adiabática consiste em partir de um estado de superposição, de modo que este estado evolua até um estado da base de Bell e, a aplicação da porta CNOT e Hadamard faz com que o algoritmo seja concluído.

Além dos resultados já obtidos, é necessário construir o Hamiltoniano do sistema a partir dos Hamiltonianos inicial e final, os quais são dados por (7):

$$\hat{\mathcal{H}}_i = \nu(1 - |\psi_i\rangle \langle \psi_i|), \quad (5.4)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_f = \nu(1 - |\psi_f\rangle \langle \psi_f|), \quad (5.5)$$

em que  $\nu$  é a frequência na qual o pulso de rádio frequência é aplicado sobre o sistema.

Tendo os Hamiltonianos inicial e final para o sistema, é possível escrevê-los em um espaço de Hamiltonianos (7, 54), no qual ambos podem ser conectados através de uma

curva  $s(\tau) \in [0, 1]$  da seguinte maneira:

$$\hat{\mathcal{H}}[s(\tau)] = (1 - s(\tau))\hat{\mathcal{H}}_i + s(\tau)\hat{\mathcal{H}}_f. \quad (5.6)$$

Desta forma, garante-se que em  $s(0) = 0$  o sistema esteja no estado inicial e em  $s(1) = 1$  no estado final. A curva  $s(\tau)$  é arbitrária, ou seja, ela pode assumir qualquer forma entre o intervalo no qual ela está definida. Assim, busca-se uma curva adequada que realiza a dinâmica do sistema no menor tempo possível. Esta curva está associada à Braquistócrona Quântica Adiabática que será tratada na seção seguinte.

## 5.2 Braquistócrona Quântica Adiabática

A curva Braquistócrona Quântica Adiabática (54) é uma curva que liga dois pontos do espaço em um menor tempo sobre ação de um campo (11, 16, 17).

A mudança temporal do Hamiltoniano de um sistema deve-se a ação de agentes externos que agem sobre o mesmo, como campos elétricos e magnéticos. Denota-se esses parâmetros como  $[x^1[s(\tau)], x^2[s(\tau)], \dots, x^M[s(\tau)]]$ , onde  $M$  é um conjunto de representações, o  $x^M$  representa o agente externo e  $s(\tau)$  a função que modela a forma com que esses agentes devem mudar com o tempo. Define-se a rapidez na qual o sistema será levado do estado inicial para o final, dada por (54)

$$v(\tau) = \frac{ds}{d\tau}. \quad (5.7)$$

Da condição adiabática, tem-se que

$$\frac{\left| \langle \phi_m | \dot{\hat{\mathcal{H}}} | \phi_n \rangle \right|}{g_{nm}^2} \leq \epsilon, \quad (5.8)$$

em que  $\epsilon$  está relacionado ao erro associado a condição adiabática (53), conforme a equação de condição para adiabaticidade (1, 53, 54). Usando a regra da cadeia para reescrever a taxa de variação do Hamiltoniano no tempo em relação a  $s(\tau)$ , obtém-se

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \tau} = \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \tau} \frac{\partial s}{\partial s} = \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial \tau} = \partial_s \hat{\mathcal{H}} v(\tau), \quad (5.9)$$

como  $s(\tau)$  depende apenas de  $\tau$  a derivada parcial por ser escrita como uma derivada total, a qual permite reescrever (5.8) na forma

$$\frac{v(\tau) \left| \langle \phi_m | \partial_s \hat{\mathcal{H}} | \phi_n \rangle \right|}{g_{nm}^2} \leq \epsilon. \quad (5.10)$$

A partir desse ponto será necessário fazer uma mudança na métrica do sistema, de modo que realiza-se um tratamento geométrico. Os conceitos matemáticos necessários para realizar esta mudança está fora do escopo deste trabalho, sendo encontrados em (55). Tal mudança é dada por

$$\left| \langle \phi_m | \partial_s \hat{\mathcal{H}} | \phi_n \rangle \right| = \|\partial_s \hat{\mathcal{H}}\|_{HS}, \quad (5.11)$$

em que  $HS$  é chamada de norma de Hilbert-Schmidt (54) que é nada mais do que a norma do operador, e para um operador  $\hat{B}$  qualquer, ela é escrita por

$$\|\hat{B}\|_{HS} = \sqrt{\text{Tr}[\hat{B}^\dagger \hat{B}]}. \quad (5.12)$$

Da equação (5.7), tem-se

$$d\tau = \frac{ds}{v(\tau)},$$

como  $\tau$  tem relação com o tempo de evolução do sistema, pode-se realizar integral, de modo que

$$T = \int_0^1 \frac{ds}{v[\dot{x}[s(\tau)], x[s(\tau)]]} \equiv \int_0^1 ds \mathcal{L}[\dot{x}[s(\tau)], x[s(\tau)]]. \quad (5.13)$$

Em que  $\dot{x} = \partial_s x$ , a partir da equação (5.10), é possível propor um Ansatz chamado de velocidade de evolução adiabática (54)

$$v_{ad} = \frac{\epsilon g_{nm}^2}{\|\partial_s \hat{\mathcal{H}}\|_{HS}}. \quad (5.14)$$

Assim, o Lagrangiano (5.15) do sistema é dado por

$$\mathcal{L}[\dot{x}[s(\tau)], x[s(\tau)]] = \frac{\|\partial_s \hat{\mathcal{H}}\|_{HS}}{\epsilon g_{nm}^2}, \quad (5.15)$$

em que a norma de Hilbert-Schmidt pode ser reescrita como

$$\left\| \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(s)}{\partial s} \right\|_{HS} = \left\| \sum_i^M \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(s)}{\partial s} \frac{\partial x^i}{\partial x^i} \right\|_{HS} = \left\| \sum_i^M \dot{x}^i \partial_i \hat{\mathcal{H}} \right\|_{HS}, \quad (5.16)$$

com  $\partial_i = \partial/\partial x^i$  e, portanto

$$\mathcal{L} = \frac{\|\sum_i^M \dot{x}^i \partial_i \hat{\mathcal{H}}\|_{HS}}{\epsilon g_{nm}^2}. \quad (5.17)$$

O objetivo é minimizar o tempo de evolução do sistema, conforme as ideias do cálculo variacional (11, 16, 17). Sabe-se que o caminho de menor tempo deve ser único. Logo, uma pequena variação desse trajeto deverá ser nula. Como o tempo de evolução do sistema

está relacionado a uma funcional, pode-se escrever  $T = \mathcal{T}[x(s)]$  (54), de forma que

$$\frac{\delta \mathcal{T}[x(s)]}{\delta x(s)} = 0, \quad (5.18)$$

o que fornece as equações de Euler-Lagrange (11, 16, 17)

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0. \quad (5.19)$$

De acordo com (54), só é possível obter um resultado analítico, se a Lagrangiana possuir uma dependência em um único parâmetro (dimensão). No caso estudado neste trabalho  $x[s(\tau)]$  é um campo magnético, em que  $x$  representa o campo e  $s(\tau)$  a forma na qual ele deve ser aplicado ao sistema.

Considerando um Hamiltoniano análogo ao Hamiltoniano da equação (5.6), dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = (1 - s(\tau))\hat{\mathcal{H}}_a + s(\tau)\hat{\mathcal{H}}_b,$$

em que  $\hat{\mathcal{H}}_a$  e  $\hat{\mathcal{H}}_b$  têm as formas

$$\hat{\mathcal{H}}_a = 1 - |a\rangle \langle a|, \quad (5.20)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_b = 1 - |b\rangle \langle b|, \quad (5.21)$$

de modo que

$$\langle a|b\rangle = \alpha_0, \quad (5.22)$$

$$\langle a'|b\rangle = \alpha_1, \quad (5.23)$$

em que os estados da base são  $\{|a\rangle, |a'\rangle\}$  e, assim, o auto-estado é escrito como

$$|b\rangle = \alpha_0 |a\rangle + \alpha_1 |a'\rangle. \quad (5.24)$$

Considerando a base  $\{|a\rangle, |a'\rangle\}$  como sendo a base canônica, tem-se

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |a'\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (5.25)$$

Dessa maneira, os Hamiltonianos  $\hat{\mathcal{H}}_a$  e  $\hat{\mathcal{H}}_b$ , podem ser representados por

$$\hat{\mathcal{H}}_a = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathcal{H}}_b = \begin{bmatrix} 1 - \alpha_0^2 & -\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2} \\ -\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2} & -\alpha_1^2 + 1 \end{bmatrix}, \quad (5.26)$$

em que  $\alpha_1 = \sqrt{1 - \alpha_0^2}$ . Então, o Hamiltoniano do sistema assume a forma

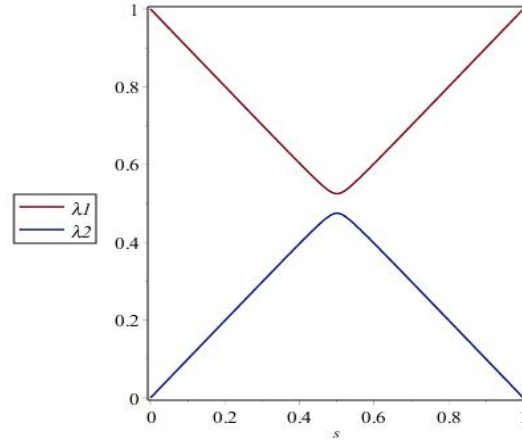
$$\hat{\mathcal{H}}[x(s)] = \begin{bmatrix} x(s)(-\alpha_0^2 + 1) & -x(s)(\alpha_0\alpha_1) \\ -x(s)(\alpha_0\alpha_1) & -\alpha_1^2 x(s) + 1 \end{bmatrix}, \quad (5.27)$$

possuindo os seguintes auto-valores

$$\lambda_1[x(s)] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{-4\alpha_0^2 x^2(s) + 4\alpha_0^2 + 4x^2(s) - 4x(s) + 1}, \quad (5.28)$$

$$\lambda_2[x(s)] = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{-4\alpha_0^2 x^2(s) + 4\alpha_0^2 + 4x^2(s) - 4x(s) + 1}, \quad (5.29)$$

Figura 5.1: Gráfico referente aos auto-valores do Hamiltoniano (5.27) em função do parâmetro  $x[s(\tau)]$ , em que  $x$  é o parâmetro externo aplicado ao sistema e  $s(\tau) = \tau$  para  $\tau \in [0, 1]$  é a forma na qual ele deve ser aplicado. Observa-se que ao aplicar um campo sobre o sistema modulado pela função  $s(\tau)$ , considerando  $\alpha_0 = 1/2$ , as linhas do espectro de energia se modificam.



Fonte: O autor

O gráfico (5.1) referente aos auto-valores do Hamiltoniano (5.27) em função do parâmetro  $x[s(\tau)]$ , em que  $x$  é o parâmetro externo aplicado ao sistema e  $s(\tau) = \tau$  para  $\tau \in [0, 1]$  é a forma na qual ele deve ser aplicado. Observa-se que ao aplicar um campo sobre o sistema modulado pela função  $s(\tau)$ , considerando  $\alpha_0 = 1/2$ , as linhas do espectro de energia se modificam. O ajuste para a separação das linhas de energia depende do valor de  $\alpha_0$ , quanto maior seu valor maior é a aproximação das linhas. Assim, a diferença de energia é dada por

$$g_{nm}[x(s)] = \lambda_2[x(s)] - \lambda_1[x(s)], \quad (5.30)$$

conhecendo dessa forma o *gap* do sistema e o Hamiltoniano é possível obter o Lagrangiano.

Como o sistema depende de um único parâmetro, então (5.17) é escrita como

$$\mathcal{L}[\dot{x}(s), x(s)] = \frac{\|\dot{x}^1 \partial_1 \hat{\mathcal{H}}\|_{HS}}{\epsilon g_{nm}^2}. \quad (5.31)$$

Para calcular a norma de Hilbert-Schmidt deriva-se o Hamiltoniano (5.27)

$$\frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dx(s)} = \begin{bmatrix} (1 - \alpha_0^2) & -\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2} \\ -\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2} & \alpha_0^2 - 1 \end{bmatrix}, \quad (5.32)$$

$$\dot{x}(s) \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dx(s)} = \begin{bmatrix} \dot{x}(s)(1 - \alpha_0^2) & -\dot{x}(s)\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2} \\ -\dot{x}(s)\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2} & \dot{x}(s)(\alpha_0^2 - 1) \end{bmatrix}. \quad (5.33)$$

Em seguida, conforme (5.12) é necessário calcular o produto de (5.33) pelo seu adjunto. Uma vez que (5.33) é hermitiana, tem-se

$$\left( \dot{x}(s) \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dx(s)} \right)^2 = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}, \quad (5.34)$$

onde os elementos da matriz são

$$\begin{aligned} m_{11} &= \dot{x}^2(s)(1 - \alpha_0^2)^2 + \dot{x}^2(s)\alpha_0^3(1 - \alpha_0^2), \\ m_{12} &= -\dot{x}^2(s)(1 - \alpha_0^2)^{3/2}\alpha_0 - \dot{x}^2(s)\alpha_0 \sqrt{1 - \alpha_0^2}(\alpha_0^2 - 1), \\ m_{21} &= \dot{x}^2(s)(1 - \alpha_0^2)^{3/2}\alpha_0^2 - \dot{x}^2(s)\alpha_0^2 \sqrt{1 - \alpha_0^2}(\alpha_0^2 - 1), \\ m_{22} &= \dot{x}^2(s)\alpha_0^3(1 - \alpha_0^2) + \dot{x}^2(s)(\alpha_0^2 - 1). \end{aligned}$$

Tomando o traço, obtém-se

$$Tr(\hat{\mathcal{H}}^\dagger \hat{\mathcal{H}}) = \dot{x}^2(s)(1 - \alpha_0^2)^2 + 2\dot{x}^2(s)\alpha_0^3(1 - \alpha_0^2) + \dot{x}^2(s)(\alpha_0^2 - 1)^2, \quad (5.35)$$

de modo que a norma de Hilbert-Schmidt fica dada por

$$\| \dot{x} \partial \hat{\mathcal{H}}[x(s)] \|_{HS} = \sqrt{\dot{x}^2(s)(1 - \alpha_0^2)^2 + 2\dot{x}^2(s)\alpha_0^3(1 - \alpha_0^2) + \dot{x}^2(s)(\alpha_0^2 - 1)^2}, \quad (5.36)$$

$$\| \dot{x} \partial \hat{\mathcal{H}}[x(s)] \|_{HS} = \dot{x}(s) \sqrt{(1 - \alpha_0^2)^2 + 2\alpha_0^3(1 - \alpha_0^2) + (\alpha_0^2 - 1)^2}, \quad (5.37)$$

onde define-se a constante

$$\beta = \sqrt{(1 - \alpha_0^2)^2 + 2\alpha_0^3(1 - \alpha_0^2) + (\alpha_0^2 - 1)^2}, \quad (5.38)$$

de modo que

$$\| \dot{x} \partial \hat{\mathcal{H}}[x(s)] \|_{HS} = \dot{x}(s) \beta. \quad (5.39)$$

A diferença de energia ao quadrado é

$$g_{nm}^2 = 4(1 - \alpha_0^2)x^2(s) + 4(\alpha_0^2 - 1)x(s) + 1, \quad (5.40)$$

em que define-se

$$\zeta = 4(1 - \alpha_0^2), \quad \gamma = 4(\alpha_0^2 - 1), \quad (5.41)$$

dessa maneira

$$g_{nm}^2[x(s)] = \zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1. \quad (5.42)$$

Assim, o Lagrangiano fica escrito na forma

$$\mathcal{L}[\dot{x}(s), x(s)] = \frac{\dot{x}(s) \beta}{\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1}, \quad (5.43)$$

de tal forma que a equação de Euler-Lagrange (5.19)

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}, \quad (5.44)$$

expressa as seguintes quantidades

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\beta}{\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1}, \quad (5.45)$$

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = - \frac{\beta \dot{x}(s)(2\zeta x(s) + \gamma)}{[\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1]^2}, \quad (5.46)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = - \frac{\beta \dot{x}(s)(2\zeta x(s) + \gamma)}{[\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1]^2}. \quad (5.47)$$

Observando as equações (5.46) e (5.47), é possível notar que elas são iguais, de modo que as equações de Euler-Lagrange são nulas, o que indica que a escolha da curva  $s(\tau)$  é arbitrária. Assim, independente da escolha da curva que conecta os Hamiltonianos, o sistema sempre vai buscar o caminho de menor tempo.

Entre todas as possíveis curvas para o sistema, busca-se a curva que mantém sua forma invariante, para isso faz-se  $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}'$  (54), de modo que

$$\mathcal{L}'[\dot{x}(s), x(s)] = \mathcal{L}^2[\dot{x}(s), x(s)]. \quad (5.48)$$

Como esperado, dentre todas as curvas possíveis para  $s(\tau)$ , existe uma que terá essa



característica. Neste caso, o Lagrangiano fica dado por

$$\mathcal{L}^2[\dot{x}(s), x(s)] = \frac{\dot{x}^2(s)\beta^2}{(\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1)^2}, \quad (5.49)$$

e, realizando o procedimento de derivação, tem-se

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}^2}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial \mathcal{L}^2}{\partial x}, \quad (5.50)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}^2}{\partial \dot{x}} = \frac{2\dot{x}(s)\beta^2}{(\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1)^2}, \quad (5.51)$$

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}^2}{\partial \dot{x}} = \frac{2\ddot{x}(s)\beta^2}{(\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1)^2} - \frac{4\dot{x}^2(s)\beta^2(2\zeta x(s) + \gamma)}{(\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1)^3}, \quad (5.52)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}^2}{\partial x} = -\frac{2\dot{x}^2(s)\beta^2(2\zeta x(s) + \gamma)}{(\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1)^3}. \quad (5.53)$$

Desse modo, obtém-se uma equação diferencial para o sistema na forma

$$\ddot{x}(s)(\zeta x^2(s) + \gamma x(s) + 1) - \dot{x}^2(s)(2\zeta x(s) + \gamma) = 0, \quad (5.54)$$

como o sistema depende apenas de um parâmetros conforme o Hamiltoniano (5.6), podemos trocar  $x[s(\tau)]$ , apenas por  $s(\tau)$ , assim a equação diferencial para o sistema fica dada por

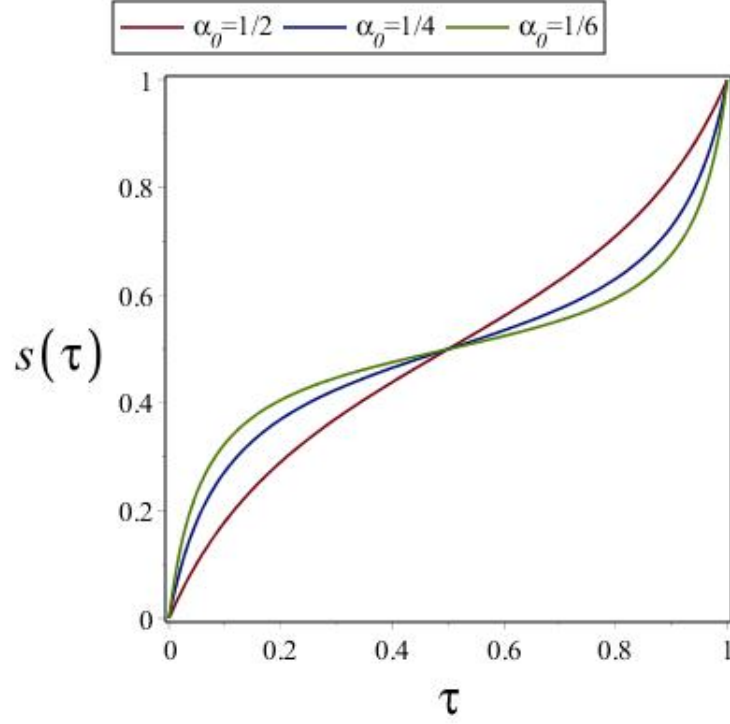
$$\ddot{s}(\tau)(\zeta s^2(\tau) + \gamma s(\tau) + 1) - \dot{s}^2(\tau)(2\zeta s(\tau) + \gamma) = 0. \quad (5.55)$$

Observando a equação (5.55), o primeiro termo contém uma derivada segunda no tempo e termos que dependem do tempo e o segundo termo contém uma derivada de primeira ordem no tempo elevada ao quadrado. A solução para  $s(\tau)$ , pode ser encontrada com um pouco de álgebra, sendo possível fazer uma integração por frações parciais, o que resulta em

$$s(\tau) = \frac{1}{2} + \frac{|\alpha_0|}{2\sqrt{1 - |\alpha_0|^2}} \tan[(1 - 2\tau) \arccos |\alpha_0|]. \quad (5.56)$$

Esta curva é chamada de Braquistócrona Quântica Adiabática, onde  $\tau \in [0, 1]$ . O gráfico desta curva é apresentado na figura (5.2) para diferentes valores de  $\alpha_0$ , sendo  $\alpha_0$  a amplitude de probabilidade do primeiro auto-vetor do sistema.

Figura 5.2: Curva da Braquistócrona Quântica Adiabática  $s(\tau)$ , para diferentes valores de  $\alpha_0$ .



Fonte: O autor

Uma vez que curva braquistócrona foi encontrada, faz-se necessário determinar o tempo de evolução adiabática do sistema. Para isso, define-se o parâmetro  $\tau$  da curva adiabática  $s(\tau)$  em termos do tempo de evolução adiabática  $T_{ad}$  como sendo  $\tau = t/T_{ad}$  (53).

### 5.3 Tempo de Evolução Adiabática

Para encontrar o tempo de evolução adiabática, parte-se da equação (5.8), escrita na forma

$$\frac{D_{max}}{g_{min}^2} \leq \epsilon, \quad (5.57)$$

em que

$$D_{max} = \left| \left\langle \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dt} \right\rangle_{m,n} \right|. \quad (5.58)$$

A equação (5.58) pode ser reescrita para obter o tempo de evolução adiabática  $T_{ad}$  na forma

$$\left| \left\langle \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dt} \right\rangle_{m,n} \right| = \frac{ds}{dt} \left| \left\langle \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{ds} \right\rangle_{m,n} \right| = \frac{1}{T_{ad}} \left| \left\langle \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{ds} \right\rangle_{m,n} \right|. \quad (5.59)$$

O Hamiltoniano para um sistema de RMN é dado por

$$\hat{\mathcal{H}}[s(\tau)] = (1 - s(\tau))\hat{\mathcal{H}}_i + s(\tau)\hat{\mathcal{H}}_f, \quad (5.60)$$

em que

$$\hat{\mathcal{H}}_i = \nu(1 - |\psi_i\rangle \langle \psi_i|), \quad (5.61)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_f = \nu(1 - |\psi_f\rangle \langle \psi_f|), \quad (5.62)$$

como foi definido anteriormente. Os estados de entrada e de saída são

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle), \quad (5.63)$$

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (5.64)$$

Logo, a matriz Hamiltoniana fica representada por

$$\hat{\mathcal{H}}[s(\tau)] = \begin{bmatrix} \nu - \frac{s(\tau)}{2}\nu & 0 & 0 & -\frac{s(\tau)}{2}\nu \\ 0 & \nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu & 0 \\ -\frac{s(\tau)}{2}\nu & 0 & 0 & \frac{s(\tau)}{2}\nu \end{bmatrix}, \quad (5.65)$$

em que seus auto-valores são

$$\lambda_1[s(\tau)] = \frac{1}{2}\nu + \frac{1}{2}\nu\sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}, \quad (5.66)$$

$$\lambda_2[s(\tau)] = \frac{1}{2}\nu - \frac{1}{2}\nu\sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}, \quad (5.67)$$

$$\lambda_3[s(\tau)] = \lambda_4[s(\tau)] = \nu. \quad (5.68)$$

Observa-se que o sistema possui uma degenerescência. Isso não irá prejudicar a análise, uma vez que são necessários apenas os auto-valores  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ . A diferença de energia entre  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  é dada por

$$g_{2,1} = -\nu\sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}. \quad (5.69)$$

Para encontrar o mínimo da diferença de energia basta derivar o argumento da raiz em relação a  $\tau$  e igualar a zero

$$g_{min}^2(s) = g_{min}^2(1/2) = \nu^2/2. \quad (5.70)$$

Os dois auto-vetores associados a  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são dados por

$$|\phi_1, s\rangle = k_1 \begin{bmatrix} -\frac{s(\tau)}{s(\tau) - 1 + \sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (5.71)$$

$$|\phi_2, s\rangle = k_2 \begin{bmatrix} -\frac{s(\tau)}{s(\tau) - 1 - \sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (5.72)$$

onde  $k_1$  e  $k_2$  são constantes de normalização dadas por

$$k_1 = \frac{1}{\sqrt{s^2(\tau)[s(\tau) - 1 + \sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}]^2 + 1}}, \quad (5.73)$$

$$k_2 = \frac{1}{\sqrt{s^2(\tau)[s(\tau) - 1 - \sqrt{2s^2(\tau) - 2s(\tau) + 1}]^2 + 1}}. \quad (5.74)$$

A partir da equação (5.58), tem-se

$$\left| \left\langle \frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dt} \right\rangle_{2,1} \right| = \frac{\nu\sqrt{2}}{2} \quad (5.75)$$

substituindo (4.70) e (4.75) em (5.57), obtém-se o tempo de evolução adiabática para o sistema, o qual é dado por

$$T_{ad} = \frac{\sqrt{2}}{\epsilon\nu}, \quad (5.76)$$

Observa-se que o tempo de evolução do sistema depende de  $\epsilon$  e  $\nu$ . Como  $\epsilon$  está relacionado com a precisão, então quanto menor o valor de  $\epsilon$  maior é o tempo de evolução adiabática. Assim, se  $\epsilon \rightarrow 0$  o tempo de evolução  $T_{ad} \rightarrow \infty$ . Esta situação está de acordo com o teorema adiabático, em que era necessário um tempo de evolução infinitamente longo para que o sistema permanecesse em seu estado fundamental.

## 5.4 Computação Quântica Não adiabática

A realização da computação quântica não adiabática será feita em um contexto de RMN para um sistema de dois  $q$ -bits. Um Hamiltoniano para um sistema de dois  $q$ -bits

acoplados em unidades de ( $\hbar=1$ ) é (1, 10, 28, 36)

$$\hat{\mathcal{H}}_z(\tau) = J\pi\hat{I}_z^1\hat{I}_z^2 + f(\tau)(\hat{I}_z^1 + \hat{I}_z^2). \quad (5.77)$$

Os índices 1 e 2 são referentes a cada subespaço de *spin* do sistema, de modo que  $\hat{I}^1$  está relacionado ao subespaço  $\mathbb{H}_1$  e  $\hat{I}^2$  com  $\mathbb{H}_2$ , o índice  $z$  em  $\hat{\mathcal{H}}_z(\tau)$  está relacionado a direção em que o pulso de rádio frequência  $f(\tau)$  é aplicado e  $J$  é a constante de acoplamento. Observa-se que o Hamiltoniano se encontra no referencial girante. Um exemplo de sistema que possui esta forma de Hamiltoniano é um sistema onde exista uma interação entre o Hidrogênio e o Carbono.

A representação matricial do Hamiltoniano (5.77) é dada por

$$\hat{\mathcal{H}}_z(\tau) = \begin{bmatrix} \frac{J\pi}{4} + f(\tau) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-J}{4}\pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-J}{4}\pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J\pi}{4} - f(\tau) \end{bmatrix}. \quad (5.78)$$

Nota-se que este Hamiltoniano apresenta uma degenerescência em seus auto-valores, os quais são dadas por

$$\lambda_1 = \frac{J\pi}{4} + 2f(\tau), \quad (5.79)$$

$$\lambda_2 = \frac{J\pi}{4} - 2f(\tau), \quad (5.80)$$

$$\lambda_3 = -\frac{J\pi}{4}, \quad (5.81)$$

$$\lambda_4 = \frac{-J\pi}{4}. \quad (5.82)$$

Essa degenerescência pode ser contornada com uma mudança nas componentes das matrizes de Pauli, de modo que

$$\hat{\mathcal{H}}_x(\tau) = J\pi\hat{I}_z^1\hat{I}_z^2 + f(\tau)(\hat{I}_x^1 + \hat{I}_x^2), \quad (5.83)$$

onde a aplicação da direção do pulso  $f(\tau)$  foi trocada de  $z$  para  $x$ . O trabalho apresentado em (7) apresenta uma mudança no Hamiltoniano do sistema de modo que o acoplamento é dado na direção de  $x$  e o pulso é dado em  $z$ , entretanto, este sistema apresenta uma dificuldade experimental para a obtenção do Hamiltoniano. Devido a este fato, fizemos uma escolha para um Hamiltoniano mais simples de ser reproduzido, e também veremos que esta escolha acarretará em uma maior complexidade para resolução de cálculos. A

representação matricial do Hamiltoniano (5.83), neste caso, é

$$\hat{\mathcal{H}}_x(\tau) = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} J\pi & 2f(\tau) & 2f(\tau) & 0 \\ 2f(\tau) & -J\pi & 0 & 2f(\tau) \\ 2f(\tau) & 0 & -J\pi & 2f(\tau) \\ 0 & 2f(\tau) & 2f(\tau) & J\pi \end{bmatrix}. \quad (5.84)$$

Neste caso os auto-valores do Hamiltoniano não são degenerados, os quais são dados por

$$\lambda_1 = \frac{1}{4} \sqrt{J^2 \pi^2 + 16f^2(\tau)}, \quad (5.85)$$

$$\lambda_2 = -\frac{1}{4} \sqrt{J^2 \pi^2 + 16f^2(\tau)}, \quad (5.86)$$

$$\lambda_3 = -\frac{1}{4} J\pi, \quad (5.87)$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{4} J\pi. \quad (5.88)$$

Além disso, seus auto-vetores ficam dados por

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_1}}(|00\rangle + |11\rangle) + \left( \frac{-J\pi + \sqrt{J^2 \pi^2 + 16f^2(\tau)}}{4f(\tau)\sqrt{m_1}} \right) (|01\rangle + |10\rangle), \quad (5.89)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_2}}(|00\rangle + |11\rangle) - \left( \frac{J\pi + \sqrt{J^2 \pi^2 + 16f^2(\tau)}}{4f(\tau)\sqrt{m_2}} \right) (|01\rangle + |10\rangle), \quad (5.90)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \quad (5.91)$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle). \quad (5.92)$$

Em que  $m_1$  e  $m_2$  são constantes de normalização.

Conforme já mencionado, a computação quântica não adiabática é feita através dos Invariantes Dinâmicos, os quais foram apresentados no capítulo 3. Neste caso, a equação para encontrar o invariante é dada por

$$\frac{\partial \hat{I}_n(\tau)}{\partial \tau} + iT_{ad}[\hat{I}_n(\tau), \hat{\mathcal{H}}(\tau)] = 0, \quad (5.93)$$

a qual mostra que é possível encontrar o invariante a partir do Hamiltoniano do sistema.

De modo geral, o Hamiltoniano de um sistema de dois  $q$ -bits, pode ser escrito como

$$\hat{\mathcal{H}}(\tau) = \sum_{i,j=0}^3 \alpha_{i,j}(\tau) (\sigma_i^1 \otimes \sigma_j^2), \quad (5.94)$$

em que o índice 0 representa a matriz identidade e os índices 1, 2, 3 representam as matrizes de Pauli. De acordo com o Hamiltoniano (5.93), pode-se escrever o Invariante com uma estrutura semelhante, da forma que segue

$$\hat{I}_n(\tau) = \sum_{i,j=0}^3 \beta_{i,j}(\tau)(\sigma_i^1 \otimes \sigma_j^2). \quad (5.95)$$

Nesta forma geral, o invariante contém 16 termos, dentre os quais existem termos que são chamados de variáveis redundantes. Entretanto, utilizar esta forma geral, torna o problema complexo. Neste sentido, é feita uma escolha particular.

Dessa maneira, busca-se um invariante que possua a mesma forma do Hamiltoniano (5.83), dado por

$$\hat{I}_n(\tau) = \beta_{10}(\tau)\sigma_x^1 + \beta_{01}(\tau)\sigma_x^2 + \beta_{23}(\tau)\sigma_y^1\sigma_z^2 + \beta_{32}(\tau)\sigma_z^1\sigma_y^2 + \beta_{22}(\tau)\sigma_y^1\sigma_y^2 + \beta_{33}(\tau)\sigma_z^1\sigma_z^2, \quad (5.96)$$

escrevendo de uma forma melhor de ser visualizado,

$$\hat{I}_n(\tau) = \beta_1(\tau)\sigma_x^1 + \beta_2(\tau)\sigma_x^2 + \beta_3(\tau)\sigma_y^1\sigma_z^2 + \beta_4(\tau)\sigma_z^1\sigma_y^2 + \beta_5(\tau)\sigma_y^1\sigma_y^2 + \beta_6(\tau)\sigma_z^1\sigma_z^2. \quad (5.97)$$

A escolha desse Invariante possui os termos do Hamiltoniano, e mais 3 termos adicionais que permitem compor uma base para o sistema. O problema é que esta forma para o invariante possui auto-valores e auto-vetores que tornam a solução do problema difícil devido à existência de muitos termos. Um modo de se contornar este problema, é reescrevendo os coeficientes do invariante da seguinte forma (7)

$$\beta_1(\tau) = \frac{g_1(\tau) + g_4(\tau)}{2}, \quad (5.98a)$$

$$\beta_2(\tau) = \frac{g_1(\tau) - g_4(\tau)}{2}, \quad (5.98b)$$

$$\beta_3(\tau) = \frac{g_2(\tau) + g_5(\tau)}{2}, \quad (5.98c)$$

$$\beta_4(\tau) = \frac{g_2(\tau) - g_5(\tau)}{2}, \quad (5.98d)$$

$$\beta_5(\tau) = \frac{g_3(\tau) + g_6(\tau)}{2}, \quad (5.98e)$$

$$\beta_6(\tau) = \frac{g_3(\tau) - g_6(\tau)}{2}, \quad (5.98f)$$

$$(5.98g)$$

substituindo no invariante (5.97) obtém-se

$$\begin{aligned}
 I_n(\tau) = & \frac{g_1(\tau) + g_4(\tau)}{2} \sigma_x^1 + \frac{g_1(\tau) - g_4(\tau)}{2} \sigma_x^2 \\
 & + \frac{g_2(\tau) + g_5(\tau)}{2} \sigma_y^1 \sigma_z^2 + \frac{g_2(\tau) - g_5(\tau)}{2} \sigma_z^1 \sigma_y^2 \\
 & + \frac{g_3(\tau) + g_6(\tau)}{2} \sigma_y^1 \sigma_y^2 + \frac{g_3(\tau) - g_6(\tau)}{2} \sigma_z^1 \sigma_z^2.
 \end{aligned} \tag{5.99}$$

Juntando os termos, referentes aos  $g$ 's

$$\begin{aligned}
 I_n(\tau) = & g_1(\tau) \Sigma_1^{(1)} - g_2(\tau) \Sigma_2^{(1)} + g_6(\tau) \Sigma_3^{(1)} \\
 & + g_3(\tau) \Sigma_1^{(2)} + g_4(\tau) \Sigma_2^{(2)} - g_5(\tau) \Sigma_3^{(2)},
 \end{aligned} \tag{5.100}$$

em que

$$\Sigma_1^{(1)} = \left( \frac{\sigma_x^1 + \sigma_x^2}{2} \right), \tag{5.101a}$$

$$\Sigma_2^{(1)} = - \left( \frac{\sigma_y^1 \sigma_z^2 + \sigma_z^1 \sigma_y^2}{2} \right), \tag{5.101b}$$

$$\Sigma_3^{(1)} = \left( \frac{\sigma_2^1 \sigma_2^2 + \sigma_3^1 \sigma_3^2}{2} \right), \tag{5.101c}$$

$$\Sigma_1^{(2)} = \left( \frac{\sigma_x^1 \sigma_x^2 - \sigma_y^1 \sigma_y^2}{2} \right), \tag{5.102a}$$

$$\Sigma_2^{(2)} = \left( \frac{\sigma_y^1 \sigma_z^2 - \sigma_z^1 \sigma_y^2}{2} \right), \tag{5.102b}$$

$$\Sigma_3^{(2)} = \left( \frac{\sigma_y^1 \sigma_y^2 + \sigma_z^1 \sigma_z^2}{2} \right). \tag{5.102c}$$

Esses novos conjuntos,  $\{\Sigma_1^{(1)}, \Sigma_2^{(1)}, \Sigma_3^{(1)}\}$  e  $\{\Sigma_1^{(2)}, \Sigma_2^{(2)}, \Sigma_3^{(2)}\}$ , fazem parte de duas álgebras  $SU(2)$  (24), de modo que

$$[\Sigma_i^{(\alpha)}, \Sigma_j^{(\alpha)}] = 2i\epsilon_{ijk} \Sigma_k^{(\alpha)}, \tag{5.103}$$

sendo  $\alpha = 1, 2$  e  $\epsilon_{ijk}$  é simbolo de Levi-Civita que obedece a seguinte relação (24, 25)

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{se } (i, j, k) \text{ é } (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2) \\ -1 & \text{se } (i, j, k) \text{ é } (3, 2, 1), (1, 3, 2), (2, 1, 3) \\ 0 & \text{se } i = j, j = k, k = i \end{cases} \tag{5.104}$$



Então a forma matricial do invariante fica

$$\hat{I}_n = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} m_{1,1} & m_{1,2} & m_{1,3} & m_{1,4} \\ m_{2,1} & m_{2,2} & m_{2,3} & m_{2,4} \\ m_{3,1} & m_{3,2} & m_{3,3} & m_{3,4} \\ m_{4,1} & m_{4,2} & m_{4,3} & m_{4,4} \end{bmatrix}, \quad (5.105)$$

$$m_{1,1} = -m_{2,2} = -m_{3,3} = m_{4,4} = g_3(\tau) - g_6(\tau)$$

$$m_{1,2} = m_{2,1}^* = g_1(\tau) - ig_2(\tau) - g_4(\tau) + ig_5(\tau)$$

$$m_{1,3} = m_{2,4}^* = m_{4,2} = m_{3,1}^* = g_1(\tau) - ig_2(\tau) + g_4(\tau) - ig_5(\tau)$$

$$m_{1,4} = -m_{2,3} = -m_{4,1} = m_{3,2} = -g_3(\tau) - g_6(\tau)$$

$$m_{3,4} = m_{4,3}^* = g_1(\tau) + ig_2(\tau) - g_4(\tau) - ig_5(\tau)$$

Os auto-valores do invariante (5.105) são dados por

$$\lambda_1 = -\sqrt{g_6^2(\tau) + g_1^2(\tau) + g_2^2(\tau)}, \quad (5.106a)$$

$$\lambda_2 = -\sqrt{g_5^2(\tau) + g_4^2(\tau) + g_3^2(\tau)}, \quad (5.106b)$$

$$\lambda_3 = \sqrt{g_5^2(\tau) + g_4^2(\tau) + g_3^2(\tau)}, \quad (5.106c)$$

$$\lambda_4 = \sqrt{g_6^2(\tau) + g_1^2(\tau) + g_2^2(\tau)}. \quad (5.106d)$$

Por mais que seus auto-valores contenham termos que dependam do tempo, eles devem evoluir mantendo-se constantes. Os auto-estados do invariante são denotados pelos Kets

$$|\phi_1(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1}} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{bmatrix}, \quad (5.107)$$

$$\begin{aligned} a_1 = & (\lambda_1 g_3^2(\tau) + 2\lambda_1 g_3(\tau)g_6(\tau) + \lambda_1 g_6^2(\tau) + 4\lambda_1 g_1^2(\tau) + 4\lambda_1 g_2^2(\tau) + g_6(\tau)g_3^2(\tau) + \\ & 2g_3(\tau)g_6^2(\tau) + 4g_3(\tau)g_1^2(\tau) + 4g_3(\tau)g_2^2(\tau) + g_6^3(\tau))/((\lambda_1 g_3(\tau) + \lambda_1 g_6(\tau) + \\ & g_3(\tau)g_6(\tau) + g_6^2(\tau) + 2g_1^2(\tau) + 2g_2^2(\tau))(2\lambda_1 + g_3(\tau) - g_6(\tau))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_1 = & -(ig_3(\tau)g_2(\tau) - ig_6(\tau)g_2(\tau) + 2ig_2(\tau)\lambda_1 + g_3(\tau)g_1(\tau) - g_1(\tau)g_6(\tau) + \\ & 2ig_1(\tau)\lambda_1)/((g_3(\tau)g_6(\tau) + \lambda_1 g_3(\tau) + g_6^2(\tau) + \lambda_1 g_6(\tau) + 2g_1^2(\tau) + 2g_2^2(\tau))) \end{aligned}$$

$$c_1 = -((2\lambda_1 + g_3(\tau) - g_6(\tau))(ig_2(\tau)) + g_1(\tau)/(g_3(\tau)g_6(\tau) + \lambda_1g_3(\tau) + g_6^2(\tau) + \lambda_1g_6(\tau) + 2g_1^2(\tau) + 2g_2^2(\tau)))$$

$$d_1 = 1$$

o fator de normalização  $N_1$

$$N_1 = |a_1|^2 + |b_1|^2 + |c_1|^2 + |d_1|^2 \quad (5.108)$$

o estado  $|\phi_1(\tau)\rangle$  será o estado utilizado para resolver o problema e descrever a dinâmica para encontrar  $f(\tau)$ .

Para o segundo auto-valor, o auto-estado será representado pelo ket

$$|\phi_2(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_2}} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ d_2 \end{bmatrix}, \quad (5.109)$$

$$a_2 = - (4\lambda_2g_5^2(\tau) + 4g_5^2(\tau)g_6(\tau) + \lambda_2g_3^2(\tau) + 2\lambda_2g_3(\tau)g_6(\tau)\lambda_2g_6^2(\tau) + 4\lambda_2g_4^2(\tau) + g_3^2(\tau) + 2g_6(\tau)g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6^2(\tau) + 4g_6(\tau)g_4^2(\tau)/(2\lambda_2 - g_3(\tau) + g_6(\tau))(\lambda_2g_3(\tau) + \lambda_2g_6(\tau) + g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + 2g_4^2(\tau) + 2g_5^2(\tau)))$$

$$b_2 = 2ig_5(\tau)\lambda_2 - ig_3(\tau)g_5(\tau) + ig_6(\tau)g_5(\tau) + 2g_4(\tau)\lambda_2 - g_3(\tau)g_4(\tau) + g_6(\tau)g_4(\tau)/(\lambda_2g_3(\tau) + \lambda_2g_6(\tau) + g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + 2g_4^2(\tau) + 2g_5^2(\tau))$$

$$c_2 = - ((2\lambda_2 - g_3(\tau) + g_6(\tau))(ig_5(\tau)g_4(\tau))/( \lambda_2g_3(\tau) + \lambda_2g_6(\tau) + g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + 2g_4^2(\tau) + 2g_5^2(\tau)))$$

$$d_2 = 1$$

o fator de normalização  $N_2$

$$N_2 = |a_2|^2 + |b_2|^2 + |c_2|^2 + |d_2|^2 \quad (5.110)$$

terceiro auto-estado para o terceiro auto-valor representado pelo ket

$$|\phi_3(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_3}} \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \\ d_3 \end{bmatrix}, \quad (5.111)$$

$$a_3 = (4\lambda_2 g_5^2(\tau) + 4g_5^2(\tau)g_6(\tau) + \lambda_2 g_3^2(\tau) + 2\lambda_2 g_3(\tau)g_6(\tau)\lambda_2 g_6^2(\tau) + 4\lambda_2 g_4^2(\tau) + g_3^2(\tau) + 2g_6(\tau)g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6^2(\tau) + 4g_6(\tau)g_4^2(\tau)/(2\lambda_2 - g_3(\tau) + g_6(\tau))(\lambda_2 g_3(\tau) + \lambda_2 g_6(\tau) + g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + 2g_4^2(\tau) + 2g_5^2(\tau)))$$

$$b_3 = -(2ig_5(\tau)\lambda_2 - ig_3(\tau)g_5(\tau) + ig_6(\tau)g_5(\tau) + 2g_4(\tau)\lambda_2 - g_3(\tau)g_4(\tau) + g_6(\tau)g_4(\tau)/(\lambda_2 g_3(\tau) + \lambda_2 g_6(\tau) + g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + 2g_4^2(\tau) + 2g_5^2(\tau)))$$

$$c_3 = ((2\lambda_2 - g_3(\tau) + g_6(\tau))(ig_5(\tau)g_4(\tau))/(\lambda_2 g_3(\tau) + \lambda_2 g_6(\tau) + g_3^2(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + 2g_4^2(\tau) + 2g_5^2(\tau)))$$

$$d_3 = 1$$

o fator de normalização  $N_3$

$$N_3 = |a_3|^2 + |b_3|^2 + |c_3|^2 + |d_3|^2 \quad (5.112)$$

e, finalmente, o último auto-estado associado ao quarto auto-valores é representado pelo ket

$$|\phi_4(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_4}} \begin{bmatrix} a_4 \\ b_4 \\ c_4 \\ d_4 \end{bmatrix}, \quad (5.113)$$

$$a_4 = (\lambda_1 g_3^2(\tau) + 2\lambda_1 g_3(\tau)g_6(\tau) + \lambda_1 g_6^2(\tau) + 4\lambda_1 g_1^2(\tau) + 4\lambda_1 g_2^2(\tau) + g_6(\tau)g_3^2(\tau) + 2g_3(\tau)g_6^2(\tau) + 4g_3(\tau)g_1^2(\tau) + 4g_3(\tau)g_2^2(\tau) + g_6^3(\tau))/(\lambda_1 g_3(\tau) + \lambda_1 g_6(\tau) + g_3(\tau)g_6(\tau) + g_6^2(\tau) + 2g_1^2(\tau) + 2g_2^2(\tau))(2\lambda_1 + g_3(\tau) - g_6(\tau))$$

$$b_4 = -(ig_3(\tau)g_2(\tau) - ig_6(\tau)g_2(\tau) + 2ig_2(\tau)\lambda_1 + g_3(\tau)g_1(\tau) - g_1(\tau)g_6(\tau) + 2ig_1(\tau)\lambda_1/(g_3(\tau)g_6(\tau) + \lambda_1 g_3(\tau) + g_6^2(\tau) + \lambda_1 g_6(\tau) + 2g_1^2(\tau) + 2g_2^2(\tau)))$$

$$c_4 = -((2\lambda_1 + g_3(\tau) - g_6(\tau))(ig_2(\tau)) + g_1(\tau)/(g_3(\tau)g_6(\tau) + \lambda_1g_3(\tau) + g_6^2(\tau) + \lambda_1g_6(\tau) + 2g_1^2(\tau) + 2g_2^2(\tau)))$$

$$d_4 = 1$$

o fator de normalização  $N_4$

$$N_4 = |a_4|^2 + |b_4|^2 + |c_4|^2 + |d_4|^2. \quad (5.114)$$

Com o Hamiltoniano (5.83) e o Invariante (5.105), é possível usá-los na equação de movimento (5.93) para encontrar as equações diferenciais para os  $g$ 's

$$\frac{\partial \hat{I}_n(\tau)}{\partial \tau} = -iT_{ad}[\hat{I}_n(\tau), \hat{\mathcal{H}}_x(\tau)], \quad (5.115)$$

obtendo assim as seguintes equações diferenciais

$$\dot{g}_1(\tau) = \pi T J g_2(\tau), \quad (5.116a)$$

$$\dot{g}_2(\tau) = -\pi T J g_1(\tau) - 2T f(\tau) g_6(\tau), \quad (5.116b)$$

$$\dot{g}_3(\tau) = 0, \quad (5.116c)$$

$$\dot{g}_4(\tau) = \pi J T g_5(\tau), \quad (5.116d)$$

$$\dot{g}_5(\tau) = -\pi J T g_4(\tau), \quad (5.116e)$$

$$\dot{g}_6(\tau) = 2T f(\tau) g_2(\tau). \quad (5.116f)$$

O conjunto de equações diferenciais acima, mostra que as equações para  $g_3, g_4, g_5$  não contribuem diretamente com a evolução dinâmica do sistema, pelo fato de  $f(\tau)$  não estar presente nessas equações. Suas soluções são facilmente obtidas

$$g_3(\tau) = g_3(0), \quad (5.117)$$

$$g_4(\tau) = g_4(0) \cos[\pi J T \tau] + g_5(0) \sin[\pi J T \tau], \quad (5.118)$$

$$g_5(\tau) = g_5(0) \cos[\pi J T \tau] - g_4(0) \sin[\pi J T \tau]. \quad (5.119)$$

Por outro lado as equações para  $g_1, g_2, g_6$  são responsáveis pela dinâmica do sistema, pelo fato de conterem o termo  $f(\tau)$ . Mas existe um problema, o conjunto de equações (5.116a), (5.116b) e (5.116f), é possível perceber que existem 4 variáveis  $g_1(\tau)$ ,  $g_2(\tau)$ ,  $g_6(\tau)$  e  $f(\tau)$ , entretanto, apenas 3 equações, o que não permite obter uma solução para essas variáveis. Uma maneira de resolver este problema, é através das condições iniciais e finais do sistema.

O estado usado para encontrar uma solução é o estado (5.107), dado por

$$|\phi_1(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1}} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{bmatrix}. \quad (5.120)$$

É devido a este estado do invariante que foi feita a escolha dos estados (5.2) e (5.3) para a realização da computação adiabática. A base na qual ele está escrito não permite obter diretamente o estado  $|00\rangle$ , que seria o estado inicial do algoritmo de Grover. Mas, é possível obter com ele um estado de superposição e um estado de Bell como condições inicial e final. Em que a condição inicial é

$$|\phi_1(0)\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (5.121)$$

e a condição final dada por

$$|\phi_1(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (5.122)$$

Como o estado  $|\phi_1\rangle$  depende de  $g_1, g_2, g_3, g_6$ , é possível a partir das condições iniciais e finais, determinar as formas dos  $g$ 's. A equação (5.116c) mostra que  $g_3$  é uma constante de modo que

$$g_3(\tau) = 1. \quad (5.123)$$

O auto-estado (5.107) possui termos complexos, entretanto pelas condições inicial e final, tem-se que as amplitudes de probabilidade do sistema devem ser reais. Assim, é necessário tomar as partes imaginárias como sendo nulas, o que implica em

$$g_2(0) = 0. \quad (5.124)$$

Com essa escolha, torna-se necessário determinar apenas  $g_1$  e  $g_6$ . Para estes, faz-se a seguinte escolha

$$g_6(0) = 0, \quad (5.125)$$

e

$$g_1(0) = -1. \quad (5.126)$$

Estas condições iniciais para os  $g$ 's geram o estado de superposição. Além disso, as

condições finais para gerar os estado de Bell são

$$g_6(1) = 1, \quad (5.127)$$

$$g_1(1) = 0. \quad (5.128)$$

Com os valores iniciais e finais para os  $g$ 's é possível a partir disso encontrar uma função que obedeça esses valores. A função escolhida aqui para  $g_1$  é dada na forma

$$g_1(\tau, n) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos[(2n-1)\pi\tau]. \quad (5.129)$$

Observa-se que na equação (5.129) foi adicionado um  $n$  à função. Em que  $n$  esta diretamente relacionado ao número de vezes que a função se repete no intervalo de tempo. Quanto maior o valor de  $n$ , mais rapidamente o sistema irá para o estado desejado. A partir de  $g_1$  é possível obter as formas para  $g_2$  e  $g_6$ , de modo que

$$g_2(\tau, n) = \frac{1}{2} \frac{(2n-1) \sin[(2n-1)\pi\tau]}{JT}, \quad (5.130)$$

para determinar  $g_6$  usá-se o auto-valor  $\lambda_1$ , dado por (5.106a), garantindo assim que a forma com que os  $g$ 's são escritos, esteja de acordo

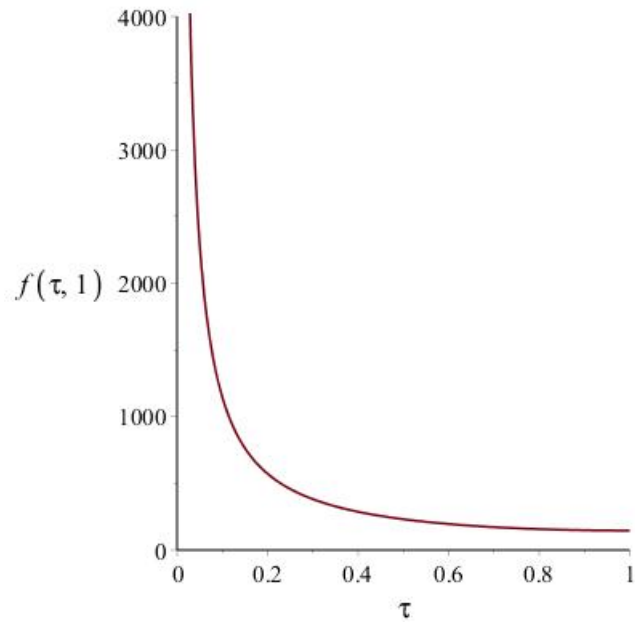
$$g_6(\tau, n) = \frac{1}{2} \sqrt{4 - 4 \left( -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos[(2n-1)\pi\tau] \right)^2 - \frac{(2n-1)^2 \sin[(2n-1)\pi\tau]^2}{J^2 T^2}}. \quad (5.131)$$

Com os  $g$ 's pode-se escrever a função  $f(\tau, n)$  através da equações (5.116f), de modo que

$$f(\tau, n) = \frac{-\frac{1}{2} \frac{(2n-1)^2 \pi \cos[(2n-1)\pi\tau]}{JT^2} - J\pi \left( -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos[(2n-1)\pi\tau] \right)}{\sqrt{4 - 4 \left( -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos[(2n-1)\pi\tau] \right)^2 - \frac{(2n-1)^2 \sin[(2n-1)\pi\tau]^2}{J^2 T^2}}}. \quad (5.132)$$

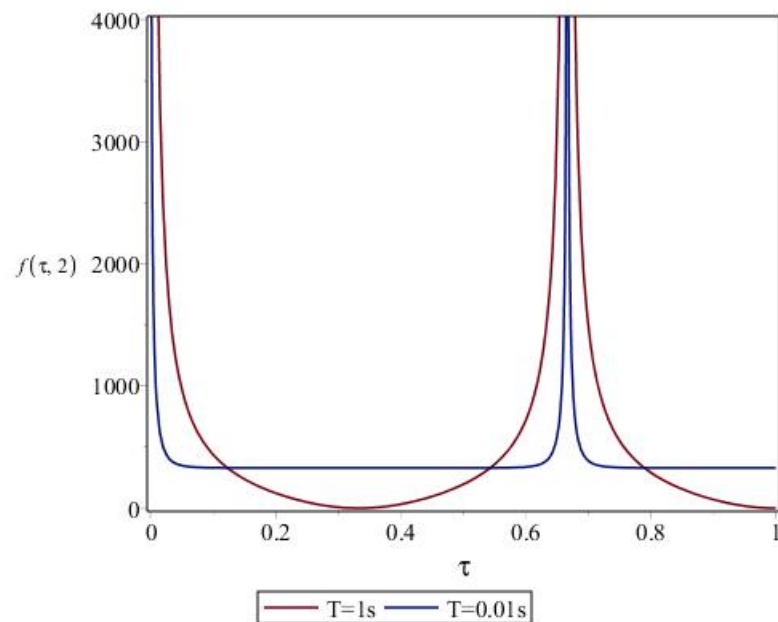
A equação (5.132), para a função  $f(\tau, n)$  depende de  $n$  e também do tempo de evolução adiabática. A figura (5.3) ilustra a função (5.132), para  $n = 1$ , a escolha de  $J = 215\text{Hz}$  é o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono, e o tempo de evolução adiabática é de 20ms

Figura 5.3: A figura ilustra a função (5.132), para  $n = 1$ , a o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono  $J = 215\text{Hz}$  e o tempo de evolução adiabática é de 20ms.



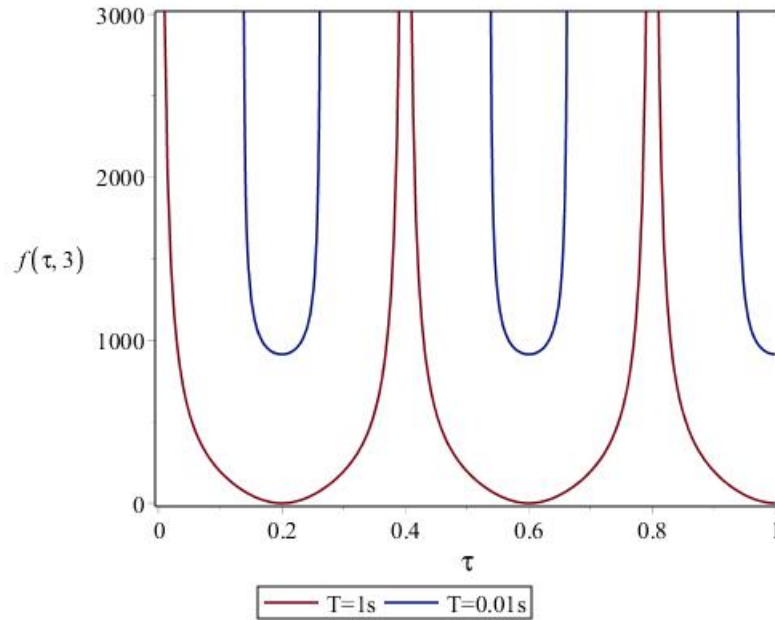
Fonte: O autor

Figura 5.4: A figura ilustra a função (5.132) para  $n = 2$ , o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono  $J = 215\text{Hz}$  e o tempo de evolução adiabática é de 1s para a curva em vermelho e de 0.01s para a curva em azul.



Fonte: O autor

Figura 5.5: A figura ilustra a função (5.132) para  $n = 3$ , o valor da constante de acoplamento entre o Hidrogênio e o Carbono  $J = 215\text{Hz}$  e o tempo de evolução adiabática é de 1s para a curva em vermelho e de 0.01s para a curva em azul.



Fonte: O autor

É possível observar claramente nas figuras (5.4) e (5.5) que o número de vezes em que a função se repete está relacionada ao valor de  $n$ . Dessa maneira, o protocolo se repetirá mais vezes no mesmo intervalo de tempo, tornando assim o processo mais rápido. É possível notar também que o tempo de evolução do sistema afeta diretamente a forma da função, de modo que, ao diminuir o tempo de evolução do sistema, a função (5.132) apresenta uma discrepância para diferentes valores de  $n$ . Isso acarreta em um problema para a obtenção do estado desejado.

A função  $f(\tau, n)$  possui uma singularidade em  $\tau = 0$ , de modo que  $f(0, n) = \infty$ . Esta função está relacionada à intensidade do campo aplicado, que por sua vez está relacionada à frequência  $\nu$  dos Hamiltonianos adiabáticos (5.4) e (5.5). Isso pode gerar um problema, devido à capacidade do equipamento de RMN. Para contornar este problema faz-se necessário começar com um pequeno acréscimo ao tempo inicial, de modo que  $t_i = 0 + d$ . Assim, faz-se a escolha de  $d$  para ajustar o valor do pulso aplicado inicialmente.

## 5.5 Operador Densidade

O operador densidade é uma ferramenta estatística que permite tratar sistemas onde o vetor de estado do sistema não é conhecido, mas apenas um conjunto de vetores  $\{|\psi_i\rangle\}$ , que ocorrem com a probabilidade  $\{p_i\}$  o conjunto  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ , é chamado de conjunto estatístico (1, 2, 21, 22, 56, 57).



Este operador descreve dois tipos de sistemas chamados de Estados Puros e Estados Mistos. O estado puro é o qual obtém-se a informação máxima sobre o sistema, no caso dos *spins* um estado puro é o qual todos os *spins* estão no mesmo estado quântico. Os estados mistos são estados que não são escritos por um única função de onda, mas por um conjunto de funções independentes, cada uma caracterizando um subconjunto do sistema. De modo que é possível escrever um estado  $|\psi_1\rangle$  com uma probabilidade  $p_1$ , um estado  $|\psi_2\rangle$  com probabilidade  $p_2$  e assim por diante, até um estado  $|\psi_k\rangle$  com probabilidade  $p_k$ , assim

$$p_1 + p_2 + \cdots + p_k = \sum_k p_k = 1. \quad (5.133)$$

Para calcular as predições Físicas de um estado correspondente a  $|\psi_k\rangle$  deve-se pesar a probabilidade  $p_k$  associada a este estado e somar sobre  $k$ . Entretanto, realização desse procedimento torna o problema bastante complicado em questões de cálculo.

Considerando que o estado do sistema é dado por

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n(t) |\phi_n\rangle, \quad (5.134)$$

onde  $\{|\phi_n\rangle\}$  forma um conjunto da base ortonormal e  $\alpha_n(t)$  satisfaz a relação

$$\sum_n |\alpha_n(t)|^2 = 1. \quad (5.135)$$

Então, tem-se um operador observável  $\hat{O}$  com os elementos de matriz dados por

$$\langle \phi_m | \hat{O} | \phi_n \rangle = O_{mn}, \quad (5.136)$$

e seu valor médio dado em um instante de tempo, é dado por

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{O} | \Psi(t) \rangle = \sum_{mn} \alpha_m^* \alpha_n O_{mn}. \quad (5.137)$$

Os produtos entre os  $\alpha_m^* \alpha_n$  estão presentes na determinação do valor médio do sistema, sendo possível observar que eles representam

$$|\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, \quad (5.138)$$

de modo que

$$\langle \phi_m | \Psi \rangle \langle \Psi | \phi_n \rangle = \alpha_m^* \alpha_n. \quad (5.139)$$

É natural introduzir o operador densidade para o estado puro  $\rho(t)$  dado por

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, \quad (5.140)$$

de modo que dado  $|\Psi(t)\rangle$  é possível obter todas as predições físicas sobre ele. A evolução temporal do sistema dá-se através da equação de Schrödinger (1.10), em que a evolução do estado é dada por

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle \quad (5.141)$$

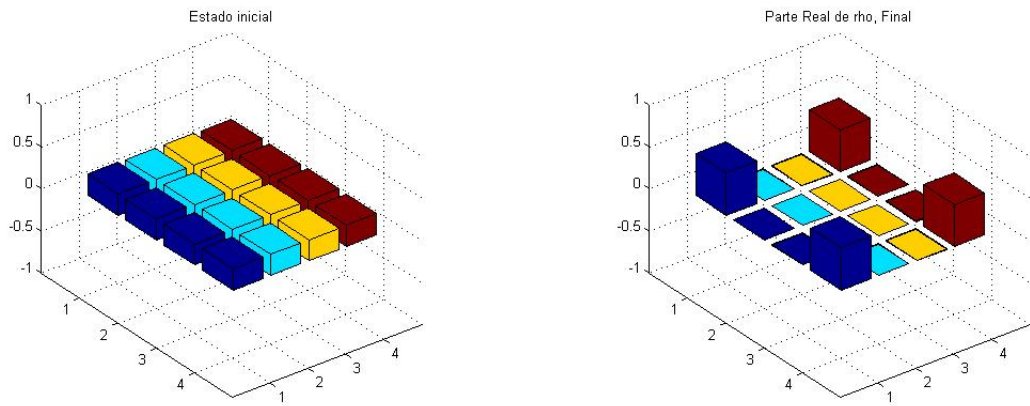
em que  $\hat{U}(t)$  é o operador de evolução temporal (1.12), dessa forma o operador (5.140), fica dado por

$$\rho(t) = \hat{U}(t)\rho(0)\hat{U}^\dagger(t), \quad (5.142)$$

A figura (5.6) representa os elementos da matriz densidade (5.142), em que o Hamiltoniano do sistema é representado pela equação (5.83) e o estado inicial (5.89).

O Hamiltoniano (5.83) depende da função  $f(\tau, n)$  de modo que ela é continua no tempo, isso não é possível de realizar-se experimentalmente. Entretanto, para que seja possível realizar o Hamiltoniano (5.83), é necessário discretizar a função  $f(\tau, n)$  no tempo, permitindo fazer uma simulação computacional do sistema. Como foi visto na figura (5.3), a função (5.134) tende ao infinito em  $\tau = 0$ , como esta função está associada a frequência na qual o pulso é aplicado sobre o sistema, é necessário fazer um deslocamento no tempo para que se tenha um valor de frequência na qual a máquina possa operar  $t_i = 0 + d$ . O valor escolhido para frequência na qual pulso inicial é aplicado é de 25kHz. Assim, para  $n = 1$  o deslocamento no tempo  $d = 0.006s$ , para  $n = 2$  o deslocamento  $d = 0.001s$ .

Figura 5.6: Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.89) com os valores de  $J=215\text{Hz}$ ,  $n=1$ ,  $\epsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é 25kHz o deslocamento no tempo é  $d = 0.006s$ , o estado inicial apresenta-se em um estado de superposição e o final em um dos estados da base de Bell, o tempo de evolução adiabática é de  $T \simeq 20\text{ms}$ .

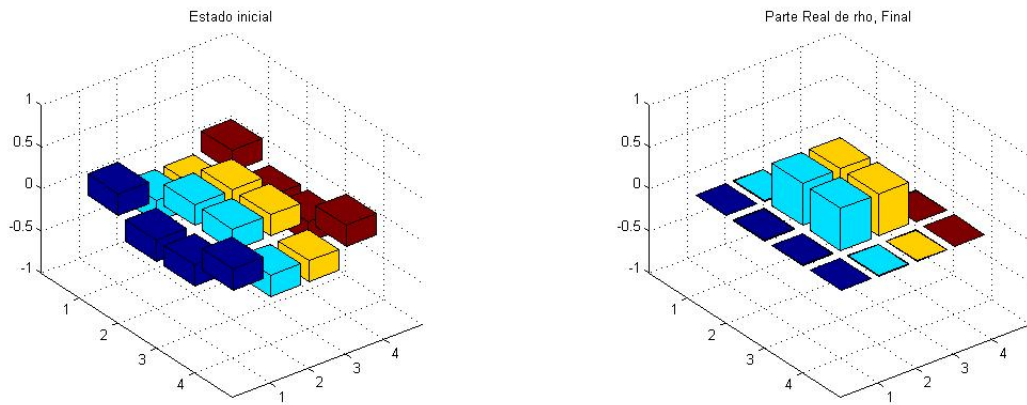


Fonte: O autor

A figura (5.6) ilustra os elementos das matrizes densidade do estado (5.89), onde o estado começa em uma superposição e termina em um estado de Bell, conforme o esperado. Cada elemento da diagonal principal corresponde a um elemento da base computacional,

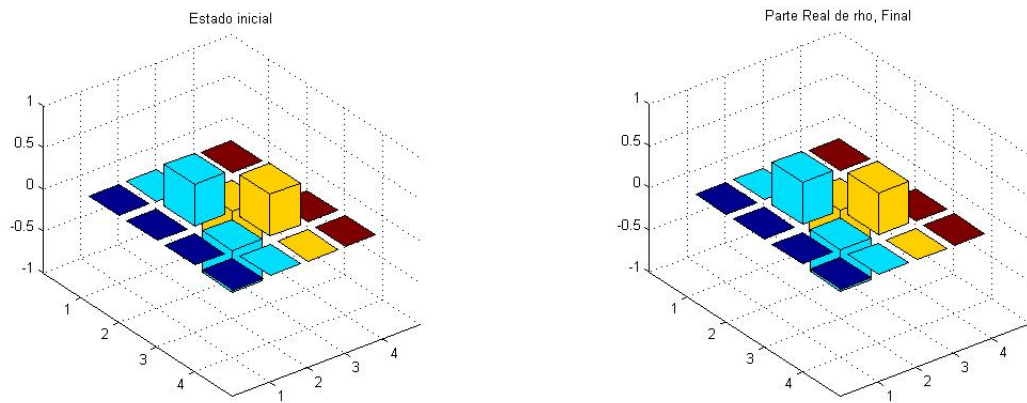
e os elementos fora da diagonal são devidos às correlações quânticas. A escolha feita para os parâmetros do sistema é devido à um sistema de Carbono e Hidrogênio, onde  $J=215\text{Hz}$ . Para os outros estados, também é possível observar o que acontece devido à aplicação da função  $f(\tau, n)$  e, os gráficos (5.7)(5.8)(5.9), são mostrados abaixo

Figura 5.7: Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.90) com os valores de  $J=215\text{Hz}$ ,  $n=1$ ,  $\epsilon = 2.10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é  $25\text{kHz}$  o deslocamento no tempo é  $d = 0.006\text{s}$ , em que o estado final em um dos estados da base de Bell, o tempo de evolução adiabática é de  $T \simeq 20\text{ms}$ .



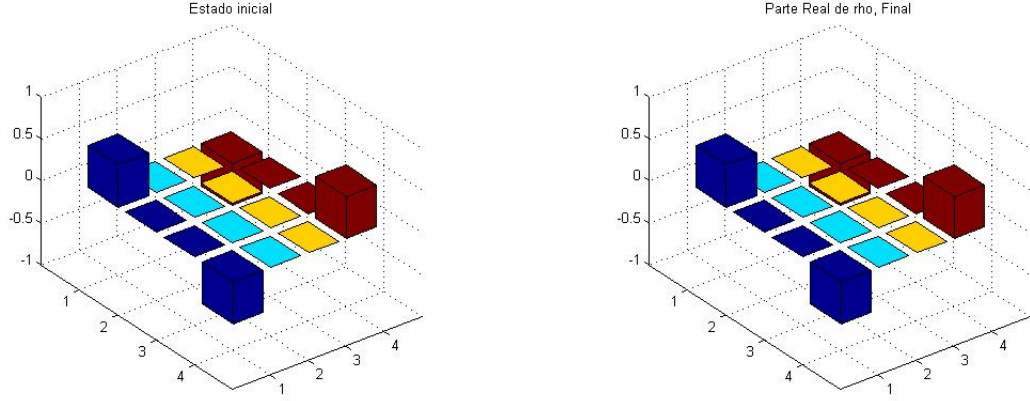
Fonte: O autor

Figura 5.8: Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.91) com os valores de  $J=215\text{Hz}$ ,  $n=1$ ,  $\epsilon = 2.10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é  $25\text{kHz}$  o deslocamento no tempo é  $d = 0.006\text{s}$ , o tempo de evolução adiabática é de  $T \simeq 20\text{ms}$ . Onde a mudança do Hamiltoniano no tempo não afeta a forma do estado.



Fonte: O autor

Figura 5.9: Gráfico dos elementos da Matriz Densidade, para o estado (5.92) com os valores de  $J=215\text{Hz}$ ,  $n=1$ ,  $\epsilon = 2.10^{-3}$ , o valor da frequência do pulso inicial é  $25\text{kHz}$  o deslocamento no tempo é  $d = 0.006\text{s}$ , o tempo de evolução adiabática é de  $T \simeq 20\text{ms}$ . Onde a mudança do Hamiltoniano no tempo não afeta a forma do estado.

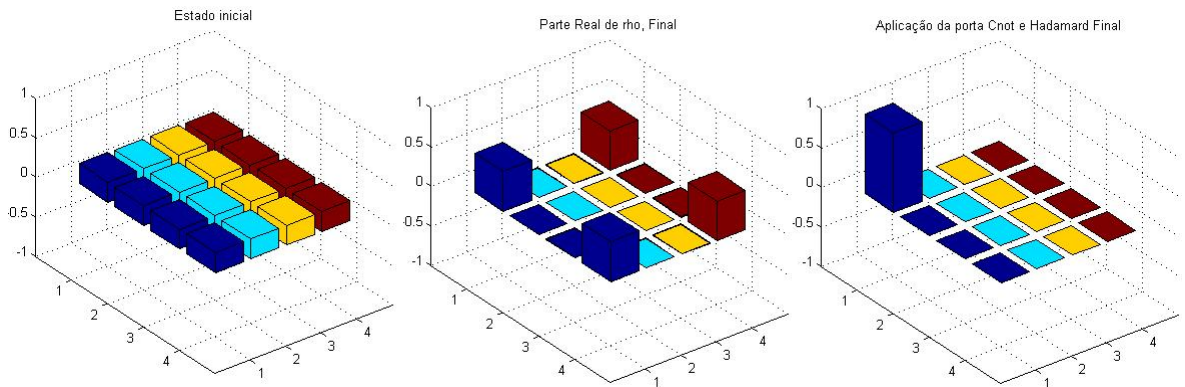


Fonte: O autor

As figuras (5.8) e (5.9) ilustram que os estados representados nas equações (5.91) e (5.92) não são afetados pelo pulso, isso já era de se esperar pelo fato de que estes estados não apresentarem uma dependência da função  $f(\tau, n)$ .

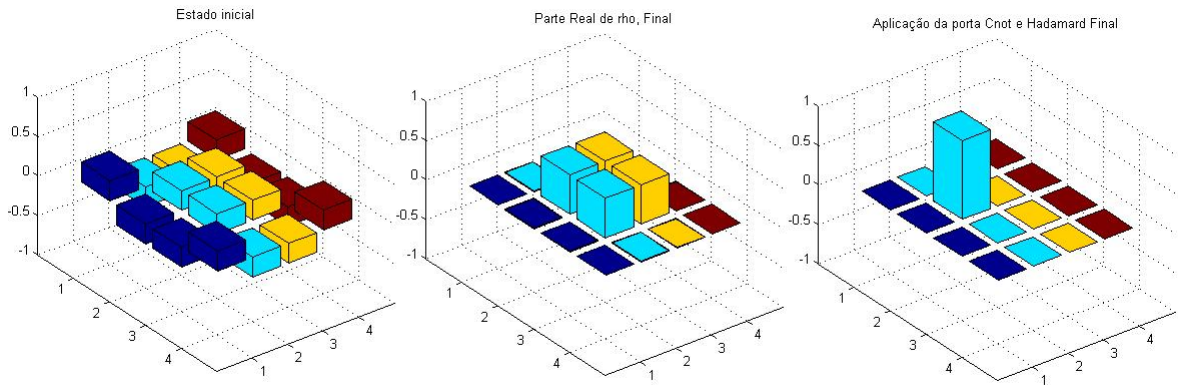
Como foi visto na seção 5.1, para que fosse concluído o algoritmo de Grover, era necessário aplicar a porta CNOT e Hadamard ao sistema, concluindo assim o algoritmo de Grover. Para todos os estados finais a aplicação das portas são ilustradas nas figuras (5.10, 5.11, 5.12, 5.13)

Figura 5.10: Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.89), após a evolução do sistema.



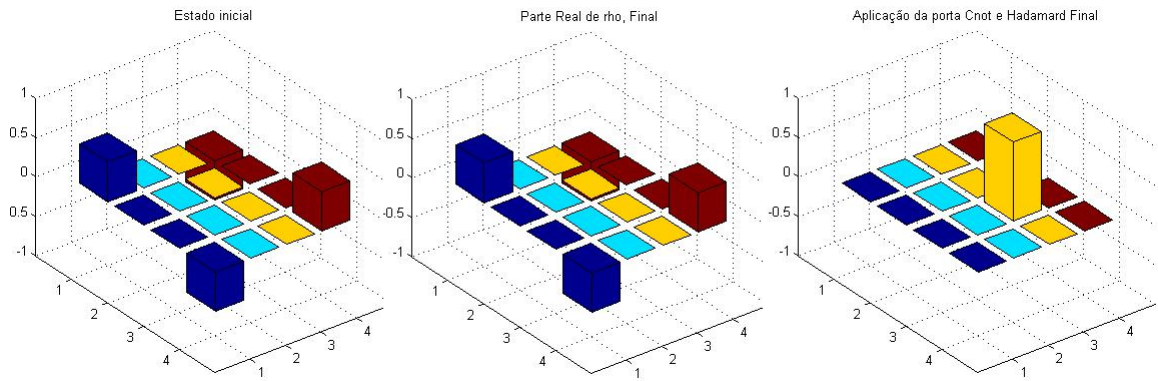
Fonte: O autor

Figura 5.11: Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.90), após a evolução do sistema.



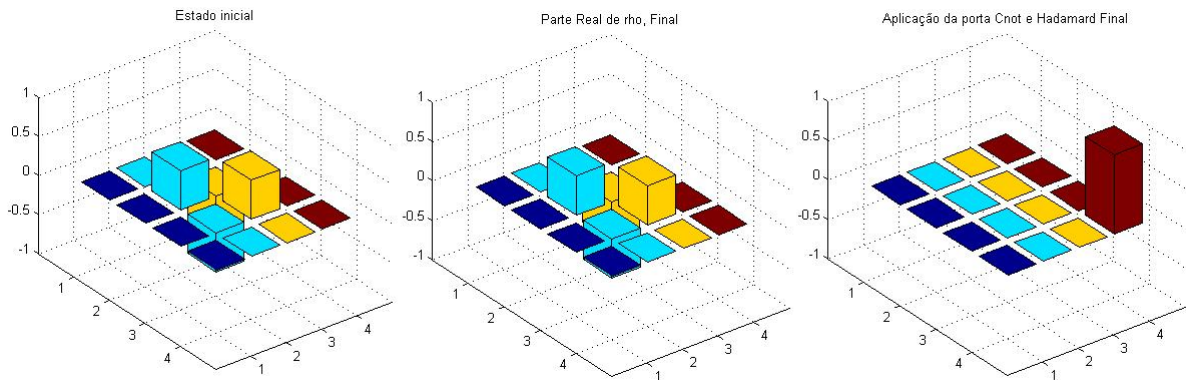
Fonte: O autor

Figura 5.12: Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.91), após a evolução do sistema.



Fonte: O autor

Figura 5.13: Aplicação da porta CNOT e Hadamard ao estado (5.92), após a evolução do sistema.



Fonte: O autor

## 5.6 Distância

Outro método útil para observar a eficiência das computações em obter o estado desejado é o conceito de distância (1). As normas de distância tem como objetivo responder de forma quantitativa questões como: se estados têm informações semelhantes e se a informação do sistema é preservada durante a sua evolução. Existem duas formas de quantificar isso, usando as normas de distância, que são denominadas de estática e dinâmica. A estática quantifica o quão próximos dois estados quânticos estão e a dinâmica, mostra como é preservada a informação quântica durante o processo evolução.

A comunidade de computação e informação quântica usa muito dessas ferramentas matemáticas. A que será utilizada é a distância de traço (1)

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2} \text{tr}(|\rho(\tau) - \rho_{Bell}|), \quad (5.143)$$

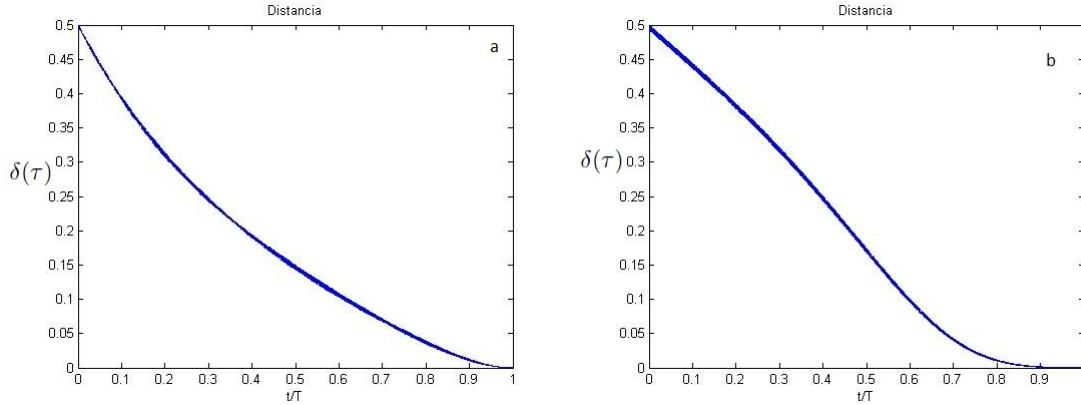
onde  $\rho_{Bell}$  é a matriz densidade do estado de Bell, que é o estado desejado após a evolução do sistema. Assim, pode-se usar desta ideia para avaliar o quão eficiente é o uso da computação quântica adiabática e não adiabática. Neste caso, é apresentado apenas para o estado representado pela equação (5.89)

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_1}}(|00\rangle + |11\rangle) - \frac{J\pi - \sqrt{J^2\pi^2 + 4f^2(\tau)}}{2f(\tau)\sqrt{m_1}}(|01\rangle + |10\rangle),$$

em que  $m_1$  é o fator de normalização. O uso desse estado é dado pelo fato de que ele evolui para o estado de Bell desejado.

A equação (5.143) é utilizada para fazer uma simulação computacional, tanto para o caso da computação adiabática quanto para a computação não adiabática. De modo que, verifica-se a eficiência dos processos em obter o resultado do algoritmo.

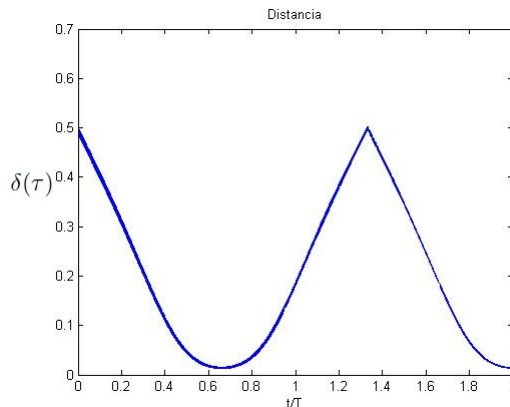
Figura 5.14: Representação da distância entre os estados durante o tempo de evolução para computação adiabática e não adiabática. A figura (a) representa a evolução adiabática para  $\nu=25\text{kHz}$  e  $\epsilon = 2.10^{-3}$ . A figura (b) representa a evolução não adiabática para  $n=1$ ,  $J=215\text{Hz}$ ,  $\epsilon = 2.10^{-3}$  e a frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de  $25\text{kHz}$  e o deslocamento de tempo  $d = 0.006\text{s}$ . O tempo de evolução adiabática é de aproximadamente  $28\text{ms}$ .



Fonte: O autor

A figura (5.14) (a) mostra que através da evolução adiabática do sistema, é possível obter o estado de Bell em  $\tau = 1$ . A figura (b) ilustra a evolução do sistema via invariantes dinâmicos. Em que é possível observar que o sistema chega ao estado de Bell um pouco antes de  $\tau = 1$ . Resultando em um pequeno ganho na eficiência em obter o resultado.

Figura 5.15: Figura mostra a distância entre os estados usando processo de evolução não adiabática para  $n=2$ ,  $J=215\text{Hz}$ ,  $\epsilon = 2.10^{-3}$  e a frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de  $25\text{kHz}$  e o deslocamento de tempo  $d = 0.001\text{s}$ . O tempo de evolução adiabática é de aproximadamente  $28\text{ms}$

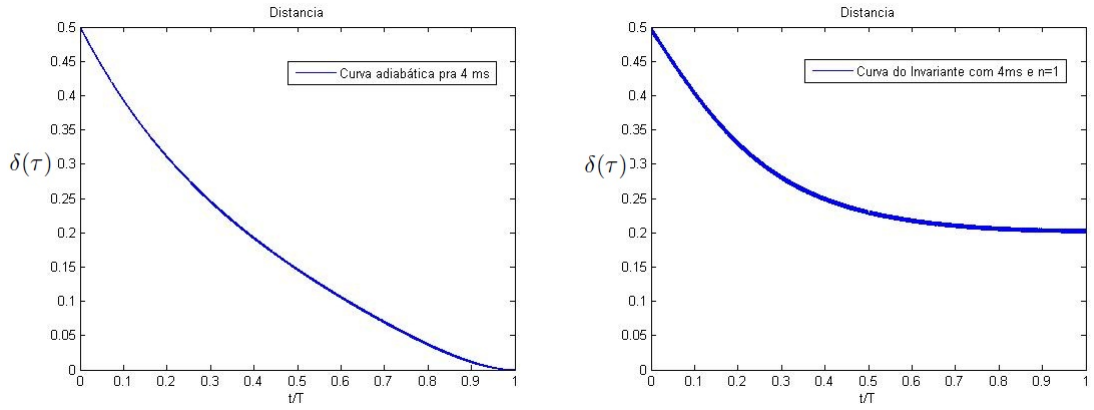


Fonte: O autor

A figura (5.15) ilustra o processo via Invariante para  $n = 2$ , observa-se que para  $n = 2$ , o processo deveria chegar ao estado desejado mais rapidamente do que para  $n = 1$ . Entretanto, o sistema não chega exatamente ao estado de Bell desejado, embora fique

muito próximo deste. Isso ocorre devido à escolha do tempo de evolução adiabática do sistema. Mostrou-se na figura (5.5), que a função  $f(\tau, n)$  apresenta uma discrepância em sua curva para diferentes valores de  $n$  ao diminuir-se o tempo de evolução adiabática. Neste sentido, fixou-se o valor de  $n = 1$ , para testar a eficiência do Invariante para tempos menores que 28ms.

Figura 5.16: Gráfico da distância para a curva adiabática e não adiabática. Para a curva adiabática tem-se  $\nu=25\text{kHz}$ ,  $\epsilon = \sqrt{2}.10^2$ , e o tempo de evolução adiabática de 4ms. A curva não adiabática tem-se  $n=1$ ,  $J=215\text{Hz}$ ,  $\epsilon = \sqrt{2}.10^{-3}$  e a frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de 25kHz e o deslocamento de tempo  $d = 0.006\text{s}$ , e o tempo de evolução é de 4ms.



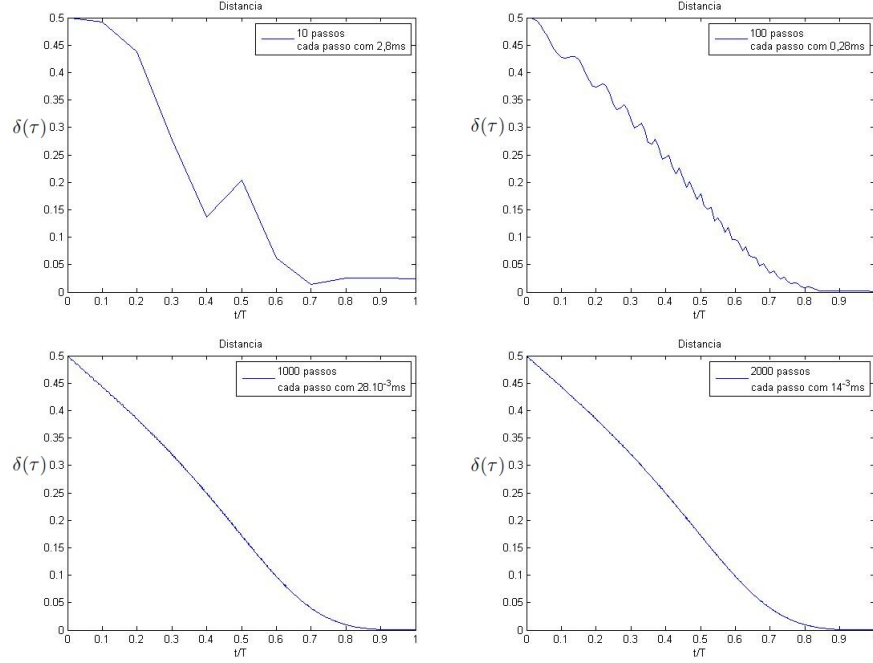
Fonte: O autor

A figura (5.16) apresenta a evolução do sistema para a computação quântica adiabática e não adiabática, e tempo de evolução é de 4ms, observa-se que a computação adiabática é capaz de obter o resultado desejado, para este tempo de evolução do sistema. Entretanto, verifica-se que mesmo para o Invariante com  $n = 1$  a dinâmica não resulta no estado desejado.

Como a função  $f(\tau, n)$  foi discretizada para a realização da simulação computacional, deve-se verificar o número de passos necessários para realizar a evolução completa do sistema, neste caso, faz-se o teste da discretização da função para um tempo de evolução de 28ms, a qual o Invariante foi capaz de obter o estado desejado.



Figura 5.17: Cuvas de distância para a função  $f(\tau, n)$  discretizada no tempo, com  $n=1$ , e o tempo de evolução é de  $T \cong 28ms$  o valor da frequência inicial na qual o pulso é aplicado é de 25kHz e o deslocamento de tempo  $d=0.006s$ .



Fonte: O autor

Observou-se através das figuras apresentadas em (5.17), que o número de passos aplicados a função, influencia no resultado final do sistema. De modo que se a quantidade de passos for pequena o objetivo não é concluído. A partir de 100 passos já é possível obter o estado desejado para a realização do algoritmo de busca.

Neste capítulo, apresentou-se os conceitos para a realização da computação quântica adiabática e não adiabática, como um maneira alternativa de obter o resultado do algoritmo de busca desenvolvido por Grover. Observou-se que essas duas formas de realizar computação, mostram-se bastante promissoras, mesmo com alguns problemas apresentados na computação quântica não adiabática. A qual, não apresentou-se capaz de realiza a dinâmica desejada para curtos intervalos de tempo. Desta forma, a computação adiabática mostrou-se capaz de realizar o protocolo em um menor intervalo de tempo. Entretanto, isso só ocorreu para a função do Hamiltoniano escolhido neste trabalho.

Funções para outros Hamiltonianos, como do trabalho (7), não apresenta este tipo de problema. Neste caso, o processo para realização de computação quântica não adiabática, pode ser realizada para curtos intervalos de tempo. A dificuldade está na obtenção do Hamiltoniano utilizado no trabalho. Este Hamiltoniano possui um acoplamento dos *spins* na direção  $x$ , enquanto o pulso de rádio frequência é aplicado na direção de  $z$ . Para obter este tipo de Hamiltoniano em um sistema de Ressonância Magnética Nuclear, é necessário uma sequência de pulsos e este Hamiltoniano só vai estar presente no sistema

por um dado intervalo de tempo, no qual o protocolo deverá ser aplicado, o que acarreta em mais dificuldades ao procedimento experimental.

O uso dos Invariantes Dinâmicos para a realização da computação quântica não adiabática, apresenta-se como uma ferramenta eficiente para a realização de protocolos computação quântica. Como apresentou-se no capítulo 4, os algoritmos quânticos são mais eficientes que os algoritmos clássicos, e o desenvolvimento de ferramentas para resolvê-los de forma mais eficiente, traz uma maior motivação para seus estudos.

# Conclusão Geral

O teorema adiabático mostra-se como uma ferramenta importante nas áreas de computação e informação quântica. Com ele foi possível realizar processos dinâmicos com Hamiltonianos dependentes do tempo, de modo que, o sistema manteve-se no estado fundamental do Hamiltoniano durante a evolução. Este tipo de fenômeno foi usado com o intuito de realizar algoritmos de computação quântica.

A utilização dos invariantes dinâmicos para a realização dos processos de computação quântica não adiabática, também mostrou-se bastante promissor. Possibilitando seguir um caminho no qual realiza-se a dinâmica desejada de modo mais eficiente que o processo adiabático.

Contudo, a escolha do Hamiltoniano para a implementação do sistema junto da escolha do invariante, gera uma função que é responsável pela dinâmica do sistema. Esta função apresenta alguns problemas no processo de computação quântica não adiabática, uma vez que quando diminui-se o tempo para a evolução do sistema, a função que depende desse parâmetro, apresenta um comportamento que não é capaz de seguir a dinâmica desejada, não concluindo o algoritmo de busca.

Dessa maneira, o processo de computação quântica adiabática consegue realizar o protocolo em um menor tempo. Este tipo de problema apresentado, leva às questões de realização experimental. Em sistemas quânticos que envolvem *spins*, a escala de tempo é da ordem de micro segundo até milissegundos e, para fins experimentais, se não for possível realizar a dinâmica com essa ordem de tempo, então sua veracidade não poderá ser testada.

## 5.7 Perspectivas Futuras

Uma perspectiva futura para o trabalho, é a realização experimental do protocolo de computação quântica não adiabática, a qual ainda não foi realizada.

Outra ideia que pode ser destacada, é o uso dos Invariantes Dinâmicos para obter transições de fases quântica em uma cadeia de spin de Heisenberg (10). Contudo, a obtenção para o Invariante deste sistema mostra-se bastante complexa e fica em aberto para quem desejar se aventurar nessa busca.

## Referências Bibliográficas

- 1 NIELSEN, M. A. C. I. L. *Quantum computation and quantum information*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000.
- 2 OLIVEIRA., R. S. S. I. S. *Computação Quântica e Informação Quântica*. [S.l.]: CBPF, 2004.
- 3 FEYNMAN, R. P. Quantum mechanical computers. *Foundations of physics*, Springer, v. 16, n. 6, p. 507–531, 1986.
- 4 DEUTSCH, D. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 400, n. 1818, p. 97–117, 1985. ISSN 0080-4630. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/400/1818/97>>.
- 5 SHOR, P. W. *Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring*. [S.l.], 1994. 124–134 p.
- 6 GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Physical review letters*, APS, v. 79, n. 2, p. 325, 1997.
- 7 HERRERA, M. et al. Nonadiabatic quantum state engineering driven by fast quench dynamics. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 89, p. 022323, Feb 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.89.022323>>.
- 8 PINTO, D. de O. S. *Emaranhamento Térmico e Simulações Quânticas de Sistemas Magnéticos por Ressonância Magnética Nuclear*. Tese (Doutorado), 2009.
- 9 PORTUGAL, C. LAVOR., L. M. e. N. M. R. *Uma introdução a computação Quântica*, Editora SBMAC, 2004. [S.l.: s.n.].
- 10 FAVARO, A. P. *Energia do estado fundamental de modelo de Heisenberg para cadeias de spin com ligações alternadas e com defeitos locais*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo.
- 11 LEMOS, N. A. *Mecânica Analítica*. [S.l.]: Universidade Federal Fluminense, 2000.
- 12 FERREIRA, G. L. Invariante adiabático gerado por lenta variação de coordenada generalizada. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 26, p. 415 – 417, 12 2004. ISSN 1806-1117. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1806-11172004000400017&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172004000400017&nrm=iso)>.

- 13 FERREIRA, G. L. sobre parâmetros dependentes do tempo em lagrangeanas e seus invariantes adiabáticos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 27, p. 379 – 380, 09 2005. ISSN 1806-1117. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1806-11172005000300013&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172005000300013&nrm=iso)>.
- 14 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. [S.l.]: Pearson, 2000.
- 15 SEGURA, C. O. O. *Teorias adiabáticas e aplicações em Ressonância Magnética Nuclear*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo.
- 16 H. CHARLES P., J. S. G. *Classical Mechanics*. [S.l.]: Editora Addison Wesley, 2000.
- 17 THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Classical Dynamics of Particles and systems, international edition*. [S.l.]: THOSON, 2008.
- 18 LEITHOLD, L.; GONZÁLEZ, F. M. *El cálculo*. [S.l.]: Oxford University Press, 1998. v. 7.
- 19 BORN, M.; FOCK, V. Beweis des adiabatenatzes. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, Springer, v. 51, n. 3, p. 165–180, 1928.
- 20 EHRENFEST, P. Adiabatische invarianten und quantentheorie, *annalen der phisik*, v. 356, n. 19, p. 327-352. 1916.
- 21 SAKURAI J. J. NAPOLITANO, J. J. *Modern Quatum Mechanics*. [S.l.]: Addison Wesley, 1994.
- 22 COHEN-TANNOUDJI, C. et al. *Quantum mechanics*. [S.l.: s.n.], 2005.
- 23 SHANKAR, R. *Principles of quantum mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 24 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical methods for physicists*. [S.l.]: AAPT, 1999.
- 25 BUTKOV, E.; CARVALHO, J. B. P. F. de. *Física matemática*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 1988.
- 26 SARANDY, M. S.; WU, L.-A.; LIDAR, D. A. Consistency of the adiabatic theorem. *Quantum Information Processing*, Kluwer Academic Publishers, Hingham, MA, USA, v. 3, n. 6, p. 331–349, dez. 2004. ISSN 1570-0755. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s11128-004-7712-7>>.
- 27 BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 392, n. 1802, p. 45–57, 1984. ISSN 0080-4630. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/392/1802/45>>.
- 28 SLITCHER. *Principles of nuclear magnetic resonance microscopy*. [S.l.]: Oxford University Press, 1991.
- 29 BETH, T.; LEUCHS, G. *Quantum information processing*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2006.

- 30 GRIFFITHS, J. D. *Eletrodinâmica*. [S.l.]: Pearson Education, 2011.
- 31 JACKSON, D. J. *Classical Eletrodynamics*. [S.l.]: John Wiley, 1998.
- 32 REITZ FREDERICK J. MILFORD, R. W. C. J. R. *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*. [S.l.]: CAMPUS, 1982.
- 33 LLEWELLYN, P. A. T. E. R. A. *Física Moderna, 5ª Ed.* [S.l.]: LTC, 2014.
- 34 RESNICK, R. E. E. R. *Física Quântica*. [S.l.]: Campus, 1988.
- 35 OLIVEIRA, I.; GUIMARÃES, A. Interações hiperfinais. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, 2000.
- 36 OLIVEIRA, I. et al. *NMR quantum information processing*. [S.l.]: Elsevier, 2011.
- 37 SILVA, A. L. B. B. E. *Elementos Históricos de Ressonância Magnética Nuclear*. [S.l.]: SÃO CARLOS, 2004.
- 38 BLOCK, F. Harnessing nuclear spin polarization fluctuations in a semiconductor nanowire. *Nature physics*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 10, p. 631–635, 2013.
- 39 CHEN, X.; TORRONTAGUI, E.; MUGA, J. G. Lewis-riesenfeld invariants and transitionless quantum driving. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 83, p. 062116, Jun 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.062116>>.
- 40 LEWIS, H. R. Classical and quantum systems with time-dependent harmonic-oscillator-type hamiltonians. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 18, p. 510–512, Mar 1967. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.18.510>>.
- 41 LEWIS, H. R.; RIESENFELD, W. B. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field. *Journal of Mathematical Physics*, v. 10, n. 8, p. 1458–1473, 1969. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1664991>>.
- 42 BENENTI, G.; CASATI, G.; STRINI, G. *Principles of quantum computation and information: Volume II: Basic Tools and Special Topics*. [S.l.]: World Scientific Publishing Co Inc, 2007.
- 43 BACON, D.; FLAMMIA, S. T. Adiabatic gate teleportation. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 103, p. 120504, Sep 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.120504>>.
- 44 SARANDY, M. S.; LIDAR, D. A. Adiabatic quantum computation in open systems. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 95, p. 250503, Dec 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.250503>>.
- 45 ZUREK, W. H.; DORNER, U.; ZOLLER, P. Dynamics of a quantum phase transition. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 95, p. 105701, Sep 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.105701>>.
- 46 BACON, D.; FLAMMIA, S. T.; CROSSWHITE, G. M. Adiabatic quantum transistors. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 3, p. 021015, Jun 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.3.021015>>.

- 47 SCHÜTZHOLD, R.; SCHALLER, G. Adiabatic quantum algorithms as quantum phase transitions: First versus second order. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 74, p. 060304, Dec 2006. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.74.060304>.
- 48 JOHNSON, M. W. et al. Quantum annealing with manufactured spins. *Nature*, Nature Research, v. 473, n. 7346, p. 194–198, 2011.
- 49 FRIEDENAUER, A. et al. Simulating a quantum magnet with trapped ions. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 4, n. 10, p. 757–761, 2008.
- 50 KIM, K. et al. Quantum simulation of frustrated ising spins with trapped ions. *Nature*, Nature Research, v. 465, n. 7298, p. 590–593, 2010.
- 51 SIMON, J. et al. Quantum simulation of antiferromagnetic spin chains in an optical lattice. *Nature*, Nature Research, v. 472, n. 7343, p. 307–312, 2011.
- 52 ROLAND, J.; CERF, N. J. Quantum search by local adiabatic evolution. *Physical Review A*, APS, v. 65, n. 4, p. 042308, 2002.
- 53 ROLAND, J.; CERF, N. J. Quantum search by local adiabatic evolution. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 65, p. 042308, Mar 2002. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.65.042308>.
- 54 REZAKHANI, A. et al. Quantum adiabatic brachistochrone. *Physical review letters*, APS, v. 103, n. 8, p. 080502, 2009.
- 55 NAKAHARA, M. *Geometry, Topology and Physics* (Adam Hilger, New York, 1990). [S.l.: s.n.].
- 56 BLUM, K. *Density Matrix Theory and Applications*, 3<sup>ª</sup> ed, Springer, 2012. [S.l.: s.n.].
- 57 R. LEIGHTON., S. F. *The Feynman Lectures on Physics, vol.3, Bookman 2008*. [S.l.: s.n.].