

**Estudo da decoerência e da dissipação quântica durante  
a evolução tempoal de dois Qubits ditadas por operações  
unitárias controladas**

**Felipe Fernandes Fanchini**

Dissertação apresentada ao  
Instituto de Física de São  
Carlos, da Universidade de São  
Paulo, para obtenção do título  
de Mestre em Ciências: Física  
Básica.

Orientador: Prof. Dr. Reginaldo de J. Napolitano

São Carlos - 2004

USP/IFSC/SBI



8-2-001641

**IFSC-USP** SERVIÇO DE BIBLIOTECA  
INFORMAÇÃO

IFSC - SBI
CLASS.....
CUTTER.....
TOMBO.....

**Fanchini, Felipe Fernandes**

**“Estudo da decoerência e da dissipação quântica durante a evolução tempoal de dois qubits ditadas por operações unitárias controladas.”**

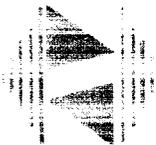
**Felipe Fernandes Fanchini – São Carlos, 2004**

**Dissertação (Mestrado) – Área de Física Básica do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo**

**2004 - Páginas: 52**

**Orientador: Prof. Dr. Reginaldo de J. Napolitano**  
**Computação quântica, dissipação, decoerência.**

**I. Título**



**IFSC** UNIVERSIDADE  
DE SÃO PAULO  
Instituto de Física de São Carlos

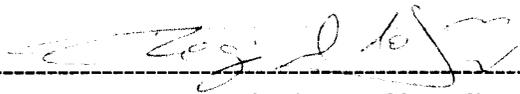
Caixa Postal 369  
13560-970 São Carlos, SP  
Av. Trabalhador São-carlense, 400.  
13566-590 São Carlos, SP

Fone/Fax 16 3373 9777

www.usp.br  
www.ifsc.usp.br

**MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE FELIPE FERNANDES FANCHINI, APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 23/08/2004.**

**COMISSÃO JULGADORA:**

  
-----  
**Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano (Orientador) – IFSC/USP**

  
-----  
**Prof. Dr. Celso Jorge Villas Boas - UFSCar**

  
-----  
**Prof. Dr. Tito José Bonagamba – IFSC/USP**

-----

---

# Agradecimentos

---

Primeiramente, agradeço ao Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano, meu orientador, pelos seus ensinamentos, sugestões, e constante apoio durante toda esta pesquisa. Tê-lo como orientador foi o meu maior aprendizado.

Agradeço à CAPES e ao INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP, pelo apoio constante e por todas as oportunidades a mim conferidas durante todos esses anos.

Agradeço imensamente aos meus pais Humberto Fanchini Filho e Ana Lúcia Fernandes Fanchini pelo carinho, amor e todas as oportunidades que me proporcionaram durante toda minha vida. Com as mais sinceras palavras, muitíssimo obrigado por tudo. Amo muito vocês.

Aos meus irmãos Humberto Fanchini Neto e Rafael Fernandes Fanchini, pelo nosso convívio durante toda a infância e parte da juventude. Pelo apoio e incentivo que sempre recebi e senti de vocês. Apesar de atualmente pouco nos encontrarmos, vocês significam muito pra mim.

Aos meus avôs Antônio de Araújo Fernandes e Humberto Fanchini (*in memoriam*) e minhas avós Eugênia Passos Fernandes e Irma Mazzucco Fanchini por serem estes exemplos de vida a todos nós netos e filhos.

À minha querida Carla pelo enorme amor, carinho e presença constante em todos os momentos de minha vida; por sua paciência infinita que suporta todos os meus erros e contradições. A vida ao seu lado é a minha maior conquista.

Meu muito obrigado à querida Miriam por ser esta pessoa trabalhadora e honesta, que muito me ajudou, de inúmeras maneiras, durante toda a vida.

Meus agradecimentos aos *ochocompanheiros* Luis Henrique Libardi (Tio Li), Murilo Del Rio Duarte

(Gordo), Rogério Saito Ono (Japa), Vitor Alexandre Campos Figueiredo (Mineiro), Maurício Jungi Outuka (Mau), Marco Antônio Del Rio de Boni (Divinão), Juliano Souza Ribeiro (Frajola) e Sérgio Lindau (Larica), por todas as festas e aqueles inesquecíveis anos que moramos juntos.

Enfim, meu muito obrigado a todos aqueles que de uma maneira ou outra acabei conhecendo, e que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

---

# Conteúdo

---

<b>Agradecimentos</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>vii</b>
<b>Resumo</b>	<b>viii</b>
<b>Abstract</b>	<b>x</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Conceitos Fundamentais</b>	<b>4</b>
2.1 Quantum bits . . . . .	4
2.2 Coerência e Decoerência . . . . .	5
2.3 Portas Lógicas Quânticas . . . . .	5
<b>3 Decoerência Súbita</b>	<b>8</b>
<b>4 Operação da Porta Lógica Quântica XOR</b>	<b>15</b>
4.1 Um modelo geral para a porta lógica quântica XOR . . . . .	16
4.2 Integrador unitário . . . . .	19
4.3 Operação da porta lógica quântica XOR . . . . .	26
<b>5 Decoerência e Dissipação Durante a Operação da Porta Lógica Quântica XOR</b>	<b>30</b>
5.1 Integrais de trajetória de Feynman . . . . .	31

---

5.2	Propagador quase adiabático - QUAPI . . . . .	33
5.3	Cálculo da evolução da matriz densidade reduzida . . . . .	36
5.4	Decoerência e dissipação durante a operação da porta lógica quântica XOR . . . . .	40
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>46</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>48</b>
<b>A</b>	<b>Porta Hadamard</b>	<b>48</b>

---

# Lista de Figuras

---

4.1	Esquema da sequência de pulsos necessária para gerar a porta lógica quântica XOR.	18
4.2	Dinâmica da porta lógica quântica XOR para o caso de iguais energias de acoplamento, e para três formas diferentes de pulsos (i) quadrado (preto) (ii) e (iii) gaussiano (vermelho e verde). O tempo está na escala de $1/B$ . A condição inicial é $\rho(0) =  11\rangle\langle 11 $ .	28
5.1	Representação da integral de trajetória do operador densidade de energia reduzido, Eq. (5.6).	32
5.2	Dinâmica da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos na sua componente $\sigma^z$ para o caso de iguais energias de acoplamento e três diferentes formatos de pulsos. O tempo está na escala de $1/B^z$ , a constante de acoplamento $\gamma^z = 0.01$ e a temperatura $T = 0.01\hbar B^z/K_B$ . A condição inicial é $\rho(0) =  11\rangle\langle 11 $ .	42
5.3	Dinâmica da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos na sua componente $\sigma^x$ para o caso de iguais energias de acoplamento e três diferentes formatos de pulsos. O tempo está na escala de $1/B^z$ , a constante de acoplamento $\gamma^x = 0.01$ e a temperatura $T = 0.01\hbar B^z/K_B$ . A condição inicial é $\rho(0) =  11\rangle\langle 11 $ .	43
5.4	Dinâmica da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos para o caso de iguais energias de acoplamento para o caso (i) Ideal (sem perturbação); (ii) Decoerência; (iii) Dissipação. O tempo está na escala de $1/B^z$ e a temperatura $T = 0.01\hbar B^z/K_B$ . A condição inicial é $\rho(0) =  11\rangle\langle 11 $ .	45

---

# Resumo

---

Nessa dissertação, abordamos o problema de dois qubits interagindo com campos externos e entre si controladamente, de acordo com um Hamiltoniano considerado realista para implementação da porta lógica quântica XOR. Introduzimos acoplamentos entre as observáveis do sistema de dois qubits e um banho de osciladores harmônicos a fim de tratarmos o problema da dissipação e da decoerência.

Primeiramente nós consideramos o limite no qual a decoerência é mais rápida que qualquer processo gerado pelo Hamiltoniano do sistema. Prosseguimos então, através do método numérico conhecido como *Integrador Unitário*, com o estudo da matriz densidade do sistema durante a operação da porta lógica quântica sem incluir, inicialmente, o acoplamento com o banho de osciladores harmônicos. Finalmente, implementamos o método numérico conhecido como *Propagador quase adiabático* para estudar a decoerência e a dissipação durante a operação da porta lógica quântica XOR, a fim de analisarmos os aspectos perturbativos do sistema quântico de dois qubits.

---

# Abstract

---

In this dissertation, we approach the problem of two qubits interacting with themselves and with external fields in a controlled way, according to a Hamiltonian considered realistic to implement the XOR quantum gate. We introduce couplings between the observables of the two-qubits system and of a bath of harmonic oscillators, to treat the problems of dissipation and decoherence.

Preliminarily, we consider the limit in which decoherence is faster than any process dictated by the Hamiltonian evolution of the system. Then, through a unitary-integrator numerical method, we proceed with the study of the evolution of the density matrix of the system during the operation of the logical quantum gate, initially, without the coupling with the bath of harmonic oscillators. Finally, we use the quasiadiabatic path integral method to study the dissipation and decoherence during the logical operation, through the inclusion of the bath.

## Introdução

---

Desde 1901, quando Planck propôs que a energia apenas era emitida (dissipada) em certos pacotes chamados *quanta* (quantidade em latim), até hoje, a teoria desenvolvida por físicos como Bohr, Einstein, Debye, Schrödinger, Heisenberg, Everett e outros, a *teoria dos quanta*, vem empreendendo uma verdadeira revolução na nossa maneira de ver e compreender o universo. Os mais intrigantes e espetaculares fenômenos físicos observados como a antimatéria, a radioatividade, a supercondutividade, as interações luz-matéria (levando ao laser), a ressonância magnética e tantos outros, tem encontrado na física quântica uma sustentação coerente e consistente para previsão, explicação e instrumentalização. Segundo recentes estimativas, cerca de 30% do produto interno bruto (PIB) dos Estados Unidos hoje é baseado em invenções tornadas possíveis pela mecânica quântica. Tudo leva a crer que essa percentagem vai aumentar drasticamente, pois a solução para um dos maiores desafios postos sobre o desenvolvimento e progresso do processo de miniaturização dos transistores, elemento básico dos computadores, passa inevitavelmente pela utilização da teoria dos quanta.

Como sabemos, o processo de miniaturização atual está próximo de atingir um limite imposto pela natureza. Se o transistor for diminuído até a escala de dezenas de nanômetros (um nanometro é um milésimo de um micron, ou um bilionésimo de um metro) sua própria concepção deixará de existir. É inevitável que a próxima tecnologia dos transistores, com silício ou não, dependa direta-

mente da instrumentalização de outros efeitos quânticos para a obtenção de chips mais densos e mais velozes.

No entanto, a abordagem quântica introduz mais do que a evolução do processo de miniaturização, é mais que isso. Ela torna possível um paralelismo computacional impossível através de outras técnicas e que nos leva às portas de uma revolução no mecanismo computacional. O uso da teoria quântica para a construção de computadores miniaturizados não é apenas inevitável para a compreensão do seu funcionamento, mas também nos permite conceber um computador que usa unicamente efeitos quânticos, como o emaranhamento e a superposição, para executar tipos totalmente novos de computação que seriam impossíveis, mesmo em princípio, em qualquer computador clássico por menor que este fosse.

O interesse pela computação quântica teve início quando Feynman concluiu, em 1982, que os sistemas clássicos não seriam capazes de modelar eficientemente os sistemas mecânicos quânticos e que estes só poderiam ser modelados fazendo uso de outro sistema quântico [1]. Feynman sugeriu que computadores baseados nas leis da mecânica quântica ao invés das leis da física clássica poderiam ser usados para modelar sistemas mecânicos quânticos. Deutsch foi o primeiro a questionar a maior capacidade de processamento dos computadores quânticos em relação aos clássicos em 1985. Com esta questão, ele estendeu a teoria da computação com o desenvolvimento do computador quântico universal ou a máquina de Turing quântica [2]. Foi ele também o primeiro a publicar um algoritmo quântico, o Problema de Dois Bits de Deutsch [3]. Este algoritmo poderia responder se uma função é balanceada ou constante apenas com uma única execução da função (impensável em termos clássicos).

No entanto, até o início dos anos 90, a computação quântica era apenas uma curiosidade acadêmica. Isto só mudou quando, em 1994, Shor publicou o seu algoritmo para computadores quânticos que resolve o problema de fatoração de números grandes [4]. Com esse algoritmo, um número seria fatorado muito mais rapidamente do que com técnicas baseadas em algoritmos clássicos conhecidos, o que colocaria em cheque a segurança atual dos sistemas computacionais. Um inquietante alerta para os bancos, redes e demais corporações e instituições que fazem da segurança de seus sistemas uma questão de vida ou morte. Desde então, pesquisas experimentais

e teóricas no campo da computação quântica vêm se acelerando no mundo todo, com propostas de novas tecnologias para o desenvolvimento de computadores quânticos específicos e/ou universais (hardware) e de novos algoritmos quânticos (software) para resolver problemas considerados intratáveis pelos métodos clássicos.

Nesse trabalho procuramos estudar uma das portas lógicas quânticas necessária para elaboração do computador quântico universal, a porta lógica quântica XOR. Assim como os computadores clássicos são baseados em circuitos elétricos constituídos de portas lógicas, um computador quântico é baseado em circuitos quânticos constituídos de portas lógicas quânticas, que são usadas para transmitir e manipular a informação quântica.

No capítulo 1 desta dissertação, revisamos os principais conceitos físicos e matemáticos necessários à realização do trabalho, como os qubits, as portas lógicas quânticas e a decoerência.

No capítulo 2 começamos o estudo de um Hamiltoniano geral para o modelo de dois spins envolvendo perturbação por meio de um banho de osciladores harmônicos acoplado a estes. Estudamos o regime que chamamos de decoerência súbita. Neste, a escala de tempo da decoerência é muito menor que a escala de tempo característica do sistema, de forma que desprezamos todos os movimentos que sejam provenientes do Hamiltoniano do sistema.

No capítulo 3 definimos um Hamiltoniano específico para o sistema e desprezamos as perturbações do meio, de forma que o operador de evolução temporal, num certo tempo  $t$ , seja equivalente à aplicação de uma porta lógica quântica XOR. Para tal, implementamos o método numérico conhecido como Integrador Unitário, que é usado para resolver a dinâmica do operador evolução temporal com o Hamiltoniano dependente do tempo.

Finalmente, no capítulo 4, resolvemos a dinâmica do sistema incluindo dissipação e decoerência através do método numérico conhecido como QUAPI (quasi-adiabatic path integral), que se baseia nas integrais de trajetória de Feynman. Neste, acoplamos o Hamiltoniano específico do sistema, definido no capítulo 3, a um banho de osciladores harmônicos, de forma que pudemos analisar, assim, as perdas do sistema para o meio através do cálculo das populações do operador densidade de energia reduzido. No capítulo 5 concluímos a dissertação.

---

## Conceitos Fundamentais

---

### 2.1 Quantum bits

Assim como o bit é definido como sendo a informação elementar na computação clássica, analogamente definimos os qubits como sendo a unidade básica do computador quântico. Ao invés de sinais elétricos para codificar a informação na linguagem dos bits 0 e 1, a mecânica quântica codifica a informação usando, geralmente, sistemas de dois níveis. A vantagem adquirida ao trabalharmos com processos quânticos, é que ao contrário dos computadores clássicos, onde os bits podem estar presentes exclusivamente nos estados 0 ou 1, os qubits podem, além destes, estar num estado que é escrito, usando a notação de Dirac, como combinação linear de  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , ou seja,

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (2.1)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são números complexos que satisfazem a condição de normalização  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Os estados da forma da Eq. (2.1) recebem o nome de qubit.

É com esta nova propriedade, a superposição de estados quânticos, que os qubits se mostram superiores aos seus análogos clássicos. Ao contrário do bit, o qubit não possui somente 2 estados distintos, mas sim quantos forem as combinações possíveis de  $\alpha$  e  $\beta$  que satisfaçam a condição de normalização, ou seja, infinitos estados.

## 2.2 Coerência e Decoerência

Algumas propriedades muito importantes do qubits podem ser analisadas através do formalismo do operador densidade. Fazendo  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ , temos

$$\rho = |\alpha|^2 |0\rangle\langle 0| + |\beta|^2 |1\rangle\langle 1| + \alpha\beta^* |0\rangle\langle 1| + \alpha^*\beta |1\rangle\langle 0|, \quad (2.2)$$

de forma que temos a informação codificada tanto nos termos da diagonal  $|0\rangle\langle 0|$  e  $|1\rangle\langle 1|$ , como nos termos  $|1\rangle\langle 0|$  e  $|0\rangle\langle 1|$ . Os termos da diagonal principal são ditos populações do sistema, e são dados, como visto, pelas probabilidades de se encontrar o sistema no estado 0 ou 1. As *coerências*, por sua vez, são dadas pelos elementos fora da diagonal principal, e como pode ser visto, jamais existiriam fora de um contexto onde a combinação linear fosse cabível. É essa informação adicional tão inusitada que é o elemento fundamental para a teoria da informação quântica.

Em 1991, Zurek mostrou que a interação entre um sistema físico com uma coleção de osciladores harmônicos (simulando o meio-ambiente), leva a uma evolução não unitária do operador densidade inicial, resultando no quase imediato desaparecimento das coerências [5]. Uma parcela das informações existentes e necessárias para a efetuação de qualquer operação lógica quântica se perde de forma irreversível, de forma que se faz necessário isolar o sistema dos muitos graus de liberdade que o envolvem. É devido a este fenômeno, conhecido como *decoerência*, que atualmente a comunidade científica atribui o fato da inexistência de estados superpostos na versão clássica do mundo, e é este também, atualmente, considerado o maior obstáculo a ser vencido para obtermos um processamento de informação quântica eficiente.

## 2.3 Portas Lógicas Quânticas

Assim como a computação clássica manipula a informação através de portas lógicas clássicas, a computação quântica o faz com portas lógicas quânticas. Uma porta lógica clássica muito utilizada, a porta NOT, cuja operação é definida conforme a tabela verdade na qual  $0 \rightarrow 1$  e  $1 \rightarrow 0$ , pode facilmente ser implementada por uma análoga quântica. Imaginemos que nós tenhamos algum processo que leva o estado  $|0\rangle$  ao estado  $|1\rangle$ , e vice versa. Tal modelo é obviamente análogo ao

clássico e pode ser representado por uma matriz  $X$  definida como

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

onde os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  são representados por

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Podemos definir também, uma porta lógica quântica de 2 qubits, como a porta lógica quântica XOR, que também é conhecida como *Controlled-Not*:

$$U_{XOR} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Esta porta, como dito, possui duas entradas conhecidas como qubit de *controle* e qubit *alvo*, respectivamente, e opera conforme a tabela verdade abaixo

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; \quad |01\rangle \rightarrow |01\rangle; \quad |10\rangle \rightarrow |11\rangle; \quad |11\rangle \rightarrow |10\rangle, \quad (2.6)$$

ou seja, se o controle é igual a 0, então o qubit alvo não se altera, e, de forma inversa, se o qubit de controle é igual a 1, então o qubit alvo é invertido. No caso, os vetores que representam a base para o sistema de 2 qubits são escritos através do produto tensorial destes

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

É importante lembrar também que as portas lógicas quânticas são sempre representadas por matrizes unitárias, ou seja  $U^\dagger U = I$ , onde  $U^\dagger$  é a matriz adjunta de  $U$ , de forma que a condição de normalização sempre é preservada. As portas lógicas quânticas são também sempre reversíveis, visto que a inversa de uma matriz unitária é também uma matriz unitária, e logo, uma possível porta lógica.

---

## Decoerência Súbita

---

Em um artigo recente, Braun, Haake e Strunz [6] demonstram a universalidade da decoerência de superposições quânticas de estados no limite em que a mesma é muito mais rápida do que qualquer outro processo gerado pela hamiltoniana  $H_s$  do sistema isolado do resto do universo. O que faremos a seguir é aplicar a mesma metodologia usada por estes autores, aplicando a teoria da decoerência súbita ao problema de dois qubits, que pode ser definido pelo Hamiltoniano

$$H_{sis} = -\frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^2 \vec{B}_j(t) \cdot \vec{\sigma}_j + \hbar \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{J}(t) \cdot \vec{\sigma}_2, \quad (3.1)$$

que é um modelo realista para o caso de dois spins, que são representados pelas matrizes de Pauli  $\vec{\sigma}_1$  e  $\vec{\sigma}_2$ , sendo  $\vec{B}_1(t)$  e  $\vec{B}_2(t)$  dois campos externos dependentes do tempo que atuam independentemente cada qual no sítio de um respectivo spin e a díade  $\vec{J}$  descreve a interação controlada entre os qubits. Apesar de interferências quânticas serem onipresentes no mundo microscópico, nada pode ser visto no mundo macrosópico. Atualmente é plenamente aceito que uma das mais importantes razões para a notória ausência de superposições quânticas no mundo macrosópico é a decoerência que é imposta pelo meio-ambiente. Um parâmetro para se controlar o discernimento de franjas de interferência é a razão do comprimento de onda de de Broglie,  $\lambda$ , com um comprimento linear característico,  $\Delta$ , da estrutura usada para gerar as superposições de ondas. Quando este parâmetro é da ordem da unidade, a interferência é facilmente medida; mas quando  $\lambda/\Delta$

diminui, seja pelo crescimento de  $\Delta$ , ou pelo uso de partículas mais massivas e, portanto menores comprimentos de onda, os efeitos ondulatórios se tornam cada vez mais elusivos e eventualmente não podem ser medidos através das técnicas atuais. Como um exemplo, nós podemos pensar no experimento de dupla-fenda (onde  $\Delta$  é a distância das fendas) no qual a dificuldade para se verificar efeitos ondulatórios cresce com a diminuição de  $\lambda/\Delta$ .

Se dois estados suficientemente distintos  $|s\rangle, |s'\rangle$  são escritos inicialmente numa combinação linear  $|\phi\rangle = c|s\rangle + c'|s'\rangle$ , o operador densidade  $\rho(t)$  inicialmente é escrito como  $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$  e, então, o efeito da decoerência gera uma mistura  $|c|^2|s\rangle\langle s| + |c'|^2|s'\rangle\langle s'|$ , com amplitudes  $|c|^2, |c'|^2$  como na superposição inicial, numa escala de tempo  $\tau_{dec}$ , enquanto que a relaxação subsequente desta mistura conduz para um operador densidade estacionário  $\rho(\infty)$  num tempo característico  $\tau_{diss}$  muito maior.

Em experimentos recentes, Arndt et al. [6] observaram a razão das escalas de tempo  $\tau_{dec}/\tau_{diss}$  num experimento de difração em múltiplas fendas com objetos relativamente grandes, da ordem do tamanho de uma molécula  $C_{60}$ . O que se verificou, é que esta razão se tornou menor quanto mais distintas foram as duas componentes dos estados, de forma que se essa distinção pode ser medida por um comprimento  $\Delta \propto |s - s'|$ , podemos definir o que chamamos de *fator aceleração*,

$$\tau_{dec}/\tau_{diss} \propto (\lambda/\Delta)^\nu, \quad \nu > 1, \quad (3.2)$$

onde a razão das escalas de tempo é determinada pela razão do comprimento de onda de de Broglie por  $\Delta$  [7]. Logo, para corpos macroscópicos e, conseqüentemente, valores macroscópicos de  $\Delta$ , o fator aceleração é tão acentuado que a decoerência aparece instantaneamente, de forma que a dissipação não pode ser notada. No experimento, não se constatou a influência da decoerência, simplesmente porque  $\tau_{diss}$  e o comprimento de onda de de Broglie eram suficientemente grandes, de forma que o tempo de decoerência não foi muito menor que a escala de tempo da dissipação por algumas ordens de grandeza e, de fato, foi maior que o tempo característico do sistema na ausência de qualquer meio ambiente. Neste limite, ambas, tanto a dissipação, como a decoerência podem ser tratadas pela regra de ouro de Fermi, o que não é verdade caso tenhamos o tempo de decoerência,  $\tau_{dec}$ , menor que o tempo característico do sistema  $\tau_{sis}$ , que é exatamente o regime para o qual direcionaremos nossa atenção.

Um Hamiltoniano geral para um modelo de dois spins envolvendo perturbação por meio de um banho de osciladores harmônicos é escrito como

$$H = H_{sis} + H_{banho} + H_{int} \quad (3.3)$$

onde  $H_{sis}$  é definido pela Eq. (3.1). O termo  $H_{banho}$  representa todas as oscilações provenientes do meio ambiente e é definido, visto que estamos interessados no estudo de portas lógicas com dois qubits, como sendo seis banhos de osciladores harmônicos, já que a descrição do modelo requer que tomemos as observáveis envolvidas, componentes  $x, y, z$  das matrizes de Pauli  $\vec{\sigma}_1$  e  $\vec{\sigma}_2$ , como agentes de acoplamento a banhos de osciladores harmônicos distintos. Assim,

$$H_{banho} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[ \left( \frac{p_{ijx}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{ijx}^2 q_{ijx}^2 \right) + \left( \frac{p_{ijy}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{ijy}^2 q_{ijy}^2 \right) + \left( \frac{p_{ijz}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{ijz}^2 q_{ijz}^2 \right) \right], \quad (3.4)$$

onde a primeira somatória representa os  $N$  osciladores harmônicos e a segunda os 2 qubits. Os termos entre parênteses correspondem à energia total de cada componente  $x, y, z$  do oscilador harmônico, e é dado pela soma da energia cinética  $p_{ij}^2/2m$ , sendo  $p_{ij}$  o momento do  $i$ -ésimo oscilador do  $j$ -ésimo qubit e  $m$ , a massa, com a energia potencial  $m\omega_{ij}^2 q_{ij}^2/2$ , sendo  $\omega_{ij}$  e  $q_{ij}$ , respectivamente, a frequência característica e a posição do  $i$ -ésimo oscilador do  $j$ -ésimo qubit. Finalmente, definimos o último termo do Hamiltoniano como sendo o termo de interação. Neste acoplamos as observáveis envolvidas do sistema com os infinitos graus de liberdade do banho de osciladores harmônicos, sendo este acoplamento o fator responsável pela dissipação no sistema:

$$H_{int} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 [(g_{ijx} q_{ijx} \sigma_{jx}) + (g_{ijy} q_{ijy} \sigma_{jy}) + (g_{ijz} q_{ijz} \sigma_{jz})]. \quad (3.5)$$

Aqui  $g_{ij}$  é a constante que pondera o acoplamento entre a posição do oscilador harmônico com os qubits que no caso estão representados pelas matrizes de Pauli.

Como nosso interesse maior neste momento é estudar as facetas da decoerência súbita, ou seja, somente no regime em que a escala de tempo da decoerência é muito menor que a escala de tempo característica do sistema,

$$\tau_{dec} \ll \tau_{sis}, \quad (3.6)$$

o que faremos é desprezar todos os "movimentos" do sistema [6] e, portanto, descartamos a parte do Hamiltoniano referente a este, de forma que escrevemos o Hamiltoniano efetivo como

$$H = H_{banho} + H_{int}. \quad (3.7)$$

Com o Hamiltoniano efetivo podemos, então, resolver a dinâmica do sistema quântico. Para tal calculamos o que se define como operador densidade. Consideremos um sistema geral onde o estado num instante  $t$  é dado por:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{ij} c_i(t) c'_j(t) |s^{(i)}, q^{(j)}\rangle, \quad (3.8)$$

onde o  $\{|s^{(i)}, q^{(j)}\rangle\}$  forma uma base ortonormal para o espaço de fase, satisfazendo a condição de normalização

$$\sum_{ij} |c_i(t) c'_j(t)|^2 = 1. \quad (3.9)$$

O operador densidade de energia é então definido como:

$$\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (3.10)$$

cuja evolução pode ser calculada diretamente através da equação de Schrödinger, como observamos quando calculamos sua variação temporal

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \left[ \left( \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} \right) \langle \Psi(t)| + |\Psi(t)\rangle \left( \frac{\partial \langle \Psi(t)|}{\partial t} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} (H |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| - |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| H) = \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{\rho}] \end{aligned} \quad (3.11)$$

cuja solução é dada pela equação de Liouville-von Neumann

$$\hat{\rho}(t) = e^{-iHt/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{iHt/\hbar}. \quad (3.12)$$

Visto que os operadores relacionados ao qubit 1 e os relacionados ao qubit 2 comutam, podemos escrever uma equação de Liouville-von Neumann independente para cada qubit de forma que a densidade de energia total é escrita como um produto tensorial das densidades de energia de cada um dos qubits:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_1(t) \otimes \hat{\rho}_2(t) \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_1}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H_{(1)}, \hat{\rho}_1] \quad , \quad \frac{\partial \hat{\rho}_2}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H_{(2)}, \hat{\rho}_2], \quad (3.14)$$

onde o Hamiltoniano efetivo é reescrito como sendo

$$H = H_{(1)} + H_{(2)} \quad , \quad [H_{(1)}, H_{(2)}] = 0 \quad (3.15)$$

$$H_{(1)} = H_{(1)banho} + H_{(1)int} \quad , \quad H_{(2)} = H_{(2)banho} + H_{(2)int}, \quad (3.16)$$

$$H_{(l)banho} = \sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{p_{ilx}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{ilx}^2 q_{ilx}^2 \right) + \left( \frac{p_{ily}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{ily}^2 q_{ily}^2 \right) + \left( \frac{p_{ilz}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{ilz}^2 q_{ilz}^2 \right) \right], \quad (3.17)$$

$$H_{(l)int} = \sum_{i=1}^N [(g_{ilx} q_{ilx} \sigma_{lx}) + (g_{ily} q_{ily} \sigma_{ly}) + (g_{ilz} q_{ilz} \sigma_{lz})] \quad , \quad l \in \{1, 2\}. \quad (3.18)$$

Sendo assim, resolvemos a equação de Liouville-von Neumann para um Hamiltoniano:

$$H = H_B + H_I \quad (3.19)$$

onde  $H_B$  é o Hamiltoniano de um único banho dado pela Eq. (3.17) com  $l = 1$ , e

$$H_I = \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (3.20)$$

com

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z} \quad , \quad \vec{B} = \sum_{i=1}^N g_{ix} q_{ix} \hat{x} + \sum_{i=1}^N g_{iy} q_{iy} \hat{y} + \sum_{i=1}^N g_{iz} q_{iz} \hat{z} \quad (3.21)$$

é o Hamiltoniano de interação de um qubit na presença de um banho de osciladores harmônicos.

Resolvemos nosso operador densidade, Eq. (3.12), numa aproximação até segunda ordem de grandeza no tempo. Para tal, primeiramente examinamos os termos de primeira ordem e posteriormente os termos de ordem dois. Sendo assim, o operador densidade, numa aproximação até primeira ordem no tempo, pode ser escrito:

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i(H_B+H_I)t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{i(H_I+H_B)t/\hbar} \quad (3.22)$$

$$\hat{\rho}(t) = e^{-iH_B t/\hbar} e^{-iH_I t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{iH_I t/\hbar} e^{iH_B t/\hbar} \quad (3.23)$$

visto que

$$e^{-i(H_B+H_I)t/\hbar} = e^{-iH_B t/\hbar} e^{-iH_I t/\hbar} + O(t^2). \quad (3.24)$$

Como estamos interessados somente nas variáveis do sistema, tomamos a média sobre todos os graus de liberdade do banho de osciladores harmônicos de forma que a densidade de energia somente dependa do sistema. Tal procedimento é equivalente a somar todas as probabilidades do banho térmico de forma que somente as variáveis do sistema contribuam na probabilidade final. Definimos, então, o que chamamos de operador densidade reduzido:

$$\rho_s(t) = \text{tr}_{\text{banho}}\{\hat{\rho}(t)\}, \quad (3.25)$$

onde  $\rho_s(t)$  é o operador densidade do sistema. Substituindo a Eq. (3.23) escrevemos

$$\rho_s(t) \approx \text{tr}_{\text{banho}}\{e^{-iH_B t/\hbar} e^{-iH_I t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{iH_I t/\hbar} e^{iH_B t/\hbar}\}. \quad (3.26)$$

Devido à invariância cíclica do traço, o operador de evolução temporal do banho não contribui, pois  $e^{iH_B t/\hbar} e^{-iH_B t/\hbar} = 1$ , de forma que o operador densidade reduzido é escrito

$$\rho_s(t) = \text{tr}_{\text{banho}}\{e^{-iH_I t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{iH_I t/\hbar}\}. \quad (3.27)$$

Expandindo o exponencial e substituindo  $H_I$ , obtemos o resultado até primeira ordem no tempo:

$$\begin{aligned} \rho_s(t) &\approx \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ \left( 1 - i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B} t}{\hbar} \right) \hat{\rho}(0) \left( 1 + i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B} t}{\hbar} \right) \right\} \quad (3.28) \\ \rho_s(t) &\approx \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ \hat{\rho}(0) - i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B} t}{\hbar} \hat{\rho}(0) + \hat{\rho}(0) i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B} t}{\hbar} \right\} \approx \\ &\approx \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ \hat{\rho}(0) - \left( i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}{|\vec{B}|} \right) \frac{\vec{B} t}{\hbar} \hat{\rho}(0) + \hat{\rho}(0) \left( i \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}{|\vec{B}|} \right) \frac{\vec{B} t}{\hbar} \right\} = \text{tr}_{\text{banho}}\{\hat{\rho}(0)\}, \quad (3.29) \end{aligned}$$

pois a média sobre as posições dos osciladores harmônicos é nula. Observamos, então, que quando a decoerência é mais rápida que o tempo característico do sistema, o operador densidade reduzido evolui com uma dependência não linear no tempo, e além disso, tal fato independe da forma que o sistema se acopla ao banho térmico. Expandindo os operadores de evolução temporal até segunda ordem no tempo, o operador densidade é escrito

$$e^{-i(H_B + H_I)t/\hbar} \approx 1 - (H_B + H_I)\alpha + \frac{(H_B + H_I)^2 \alpha^2}{2} \quad \text{com} \quad \alpha = it/\hbar$$

$$e^{-i(H_B+H_I)t/\hbar} \approx 1 - (H_B + H_I)\alpha + (H_B^2 + H_I^2 + H_B H_I + H_I H_B) \frac{\alpha^2}{2} \equiv 1 - A\alpha + B\alpha^2$$

$$e^{i(H_B+H_I)t/\hbar} \approx 1 + (H_B + H_I)\alpha + (H_B + H_I)^2 \frac{\alpha^2}{2} \quad \text{com} \quad \alpha = it/\hbar$$

$$e^{i(H_B+H_I)t/\hbar} \approx 1 + (H_B + H_I)\alpha + (H_B^2 + H_I^2 + H_B H_I + H_I H_B) \frac{\alpha^2}{2} \equiv 1 + A\alpha + B\alpha^2$$

$$\rho_s(t) = \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ (1 - A\alpha + B\alpha^2) \hat{\rho}(0) (1 + A\alpha + B\alpha^2) \right\},$$

descartando os termos de primeira ordem, visto anteriormente que são nulos, e os que possuem média zero:

$$\begin{aligned} \rho_s(t) &= \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ \hat{\rho}(0) - (A\hat{\rho}(0)A)\alpha^2 + (B\hat{\rho}(0) + \hat{\rho}(0)B)\alpha^2 \right\}, \\ \rho_s(t) &= \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ \hat{\rho}(0) + \left( -H_B\hat{\rho}(0)H_B - H_I\hat{\rho}(0)H_I + \frac{H_B^2}{2}\hat{\rho}(0) + \hat{\rho}(0)\frac{H_B^2}{2} + \frac{H_I^2}{2}\hat{\rho}(0) + \hat{\rho}(0)\frac{H_I^2}{2} \right) \alpha^2 \right\}, \\ \rho_s(t) &= \text{tr}_{\text{banho}} \left\{ \hat{\rho}(0) + \left( -H_I\hat{\rho}(0)H_I + \frac{H_I^2}{2}\hat{\rho}(0) + \hat{\rho}(0)\frac{H_I^2}{2} \right) \alpha^2 \right\}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

visto que

$$\text{tr}_{\text{banho}} \{ H_B \hat{\rho}(0) H_B \} = \text{tr}_{\text{banho}} \{ H_B^2 \hat{\rho}(0) \} = \text{tr}_{\text{banho}} \{ \hat{\rho}(0) H_B^2 \}. \quad (3.31)$$

Como vemos, e é importante enfatizar, o resultado independe do banho térmico em questão, e facilmente pode ser estendido para o caso de  $n$  qubits, visto que, como dito anteriormente, a relação de comutação entre dois qubits independentes é nula. Assim, encontramos como estimativa para o operador densidade de energia do sistema, para o caso geral de  $n$  qubits, a expressão:

$$\rho_s(t) = \rho_{s1}(t) \otimes \rho_{s2}(t) \otimes \dots \otimes \rho_{sn}(t), \quad (3.32)$$

sendo que o operador densidade  $\rho$  de cada qubit é dada pela Eq. (3.30). Como podemos ver, a decoerência devido ao acoplamento do sistema com os inúmeros graus de liberdade do banho térmico se revela um fenômeno universal e independente, ou seja, sejam quais forem as características do sistema, ou mesmo do banho térmico em questão, o operador densidade possui uma dependência quadrática com o tempo. De certa forma, visto que o tempo característico em que estamos examinando o operador densidade é um tempo pequeno em relação ao tempo característico do sistema, o fato de não obtermos uma expressão para o operador densidade com uma dependência linear no tempo é bastante animador, pois uma dependência quadrática, como é o caso, é menos dissipativa para tempos curtos.

---

## Operação da Porta Lógica Quântica XOR

---

Na segunda parte de nossa dissertação continuamos a estudar a dinâmica do sistema de dois qubits, mas ao contrário do que foi feito na seção anterior, dado o Hamiltoniano geral incluindo perturbação por meio de um banho de osciladores harmônicos, Eq. (3.3), nós descartamos os termos do Hamiltoniano referentes ao banho ( $H_{banho}$ ) e à interação ( $H_{int}$ ), calculando, assim, a dinâmica exata do sistema sem perturbação. Neste caso, o Hamiltoniano é dado pelo  $H_{sis}$  que representa um sistema físico de dois qubits controlados externamente por campos magnéticos, e o operador evolução temporal é escrito como

$$U(t) = e^{-iH_{sis}t/\hbar}, \quad (4.1)$$

de forma que a dinâmica do operador densidade é dada por

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t). \quad (4.2)$$

Sendo assim, mostramos abaixo, que é possível, através de uma certa seqüência de pulsos  $\vec{B}_j(t)$ ,  $\vec{J}(t)$ , manipular os qubits de tal forma que a dinâmica do sistema seja equivalente à operação da porta lógica quântica XOR.

### 4.1 Um modelo geral para a porta lógica quântica XOR

A porta lógica XOR é uma operação de 2 qubits que pode ser modelada através do acoplamento de 2 sistemas de spin-(1/2) representados pelos operadores de Pauli  $\vec{\sigma}_j = (\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)^T$ ,  $j = 1, 2$ , onde os dois estados de cada qubit é representado pelos autoestados da componente  $\sigma_z$  de cada spin, isto é,  $|0\rangle_j \equiv |\uparrow\rangle_j$  e  $|1\rangle_j \equiv |\downarrow\rangle_j$ .

Nós supomos que cada qubit, assim como o acoplamento entre estes, possa ser controlado pelo ligar e desligar de campos externos; no caso, campos magnéticos. Este sistema pode ser generalizado, como vimos anteriormente, pelo Hamiltoniano:

$$H(t) = -\frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^2 \vec{B}_j(t) \cdot \vec{\sigma}_j + \hbar \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{J}(t) \cdot \vec{\sigma}_2. \quad (4.3)$$

A porta lógica quântica XOR pode ser construída, visto que é uma operação de dois qubits, como um caso especial do Hamiltoniano acima, de forma que uma dependência específica de  $\vec{B}(t)$  e  $\vec{J}(t)$  com o tempo conduza os estados quânticos a respeitarem a tabela verdade, Eq. (2.6), da operação lógica XOR.

O Hamiltoniano  $H_{XOR}$  pode ser escrito conforme [8] como:

$$H_{XOR}(t) = -\frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^2 \vec{B}_j(t) \cdot \vec{\sigma}_j + \hbar \sum_{j \neq k} J(t) \sigma_j^+ \sigma_k^-, \quad (4.4)$$

onde  $\sigma_j^\pm = (\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y)/2$ . Na Eq. (4.4), o acoplamento entre os dois qubits é suposto ser simétrico e é controlável externamente através da interação  $J(t)$ , dependente do tempo. No caso da porta lógica quântica XOR, escrevemos  $J^x(t) = J^y(t) \equiv J(t)$  e  $J^z = 0$ . Além disso,  $\vec{B}_j(t) = (B_j^x(t), 0, B_j^z(t))$ ,  $j = 1, 2$  são as energias dos acoplamentos dependentes do tempo devido à presença do campo magnético externo no sítio do spin  $j$  na direção longitudinal (z) ou transversal (x).

Como dito, a fim de manipular os qubits de forma a operar uma porta lógica XOR, se faz necessário uma certa seqüência de pulsos dos campos externos. Para simplificar, inicialmente, supomos que tais pulsos possam ser ligados e desligados instantaneamente e que sejam constantes durante o espaço de tempo  $t_{off} - t_{on}$  que está ligado. Nós supomos que ambos os spins são idênticos e experimentam o mesmo campo com a mesma freqüência, de forma que  $B_1^{x/z} = B_2^{x/z} \equiv B^{x/z}$ . A ordem da ação dos operadores é então seguida conforme a tabela abaixo

No.	Operação	Tempo(s)
1	$\exp \left[ i \left( \frac{\hbar}{2} (-B_1^z) \sigma_1^z + \frac{\hbar}{2} (-B_2^z) \sigma_2^z \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$0 \rightarrow t_1$
2	$\exp \left[ -i \left( \hbar (+J) \sigma_1^+ \sigma_2^- + \hbar (+J) \sigma_1^- \sigma_2^+ \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$t_1 \rightarrow t_2$
3	$\exp \left[ i \left( \frac{\hbar}{2} (-B_1^x) \sigma_1^x \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$t_2 \rightarrow t_3$
4	$\exp \left[ -i \left( \hbar (-J) \sigma_1^+ \sigma_2^- + \hbar (-J) \sigma_1^- \sigma_2^+ \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$t_3 \rightarrow t_4$
5	$\exp \left[ i \left( \frac{\hbar}{2} (-B_2^x) \sigma_2^x \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$t_4 \rightarrow t_5$
6	$\exp \left[ i \left( \frac{\hbar}{2} (-B_1^z) \sigma_1^z + \frac{\hbar}{2} (-B_2^z) \sigma_2^z \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$t_5 \rightarrow t_6$
7	$\exp \left[ i \left( \frac{\hbar}{2} (+B_2^x) \sigma_1^z + \frac{\hbar}{2} (+B_2^x) \sigma_2^z \right) \frac{t}{\hbar} \right]$	$t_6 \rightarrow t_{XOR}$

e os tempos de ligamento e desligamento dos campos são obtidos sabendo que a porta lógica quântica XOR pode ser obtida por uma sequência de operações de um- e dois-qubits de acordo com [8]:

$$U_{XOR} = U_2^x \left( \frac{\pi}{2} \right) U_2^z \left( -\frac{\pi}{2} \right) U_2^x (-\pi) U_{12} \left( -\frac{\pi}{2} \right) U_1^x \left( -\frac{\pi}{2} \right) U_{12} \left( \frac{\pi}{2} \right) U_1^z \left( -\frac{\pi}{2} \right) U_2^z \left( -\frac{\pi}{2} \right), \quad (4.6)$$

onde

$$U_j^{x/z}(\alpha) = \exp \left( i \frac{\alpha}{2} \sigma_j^{x/z} \right), j = 1, 2, \quad (4.7)$$

$$U_{12}(\beta) = \exp[i\beta(\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+)], \quad (4.8)$$

são os propagadores que agem num intervalo de tempo com o campo externo no Hamiltoniano

ligando e desligando conforme a Fig. (4.1). Os ângulos  $\alpha$  e  $\beta$  estão relacionados com o tempo de acordo com  $\alpha = B^{x/z}t$  e  $\beta = Jt$ .

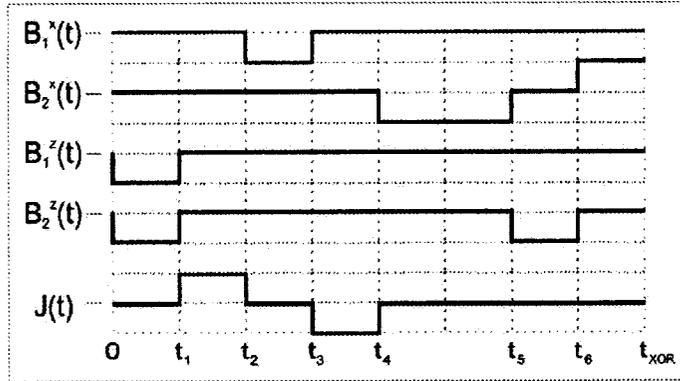


Figura 4.1: Esquema da sequência de pulsos necessária para gerar a porta lógica quântica XOR.

Os operadores dados pela Eq. (4.7) e Eq. (4.8) são operadores de rotação, assim como as matrizes de Pauli, só que para o caso de dois spins. Isso é fácil de se verificar visto que um operador geral  $U(\theta) = e^{i\theta t\vec{\sigma}}$  pode ser escrito como:

$$U(\theta) = I\cos(\theta) + i\vec{\sigma}\sin(\theta) \quad (4.9)$$

onde  $I$  é a matriz identidade e  $\vec{\sigma}$  é a matriz de Pauli. Sendo assim,  $U(\theta)$  é uma matriz de rotação cujos termos são ponderados conforme o  $\sin(\theta)$  e o  $\cos(\theta)$ . No caso da Eq. (4.7) e Eq. (4.8),  $\theta$  é proporcional ao tempo e aos campos  $B$  ou  $J$ , de forma que podemos manipular as rotações dos qubits ajustando estas variáveis.

A Fig. (4.1) mostra a sequência de pulsos necessária para aplicar a porta lógica quântica XOR. Entre o tempo 0 e  $t_1$  ligamos os campos  $B_1$  e  $B_2$  respectivos a cada qubit, na direção  $-\hat{z}$  impondo que  $t_1 = \frac{\pi}{2B}$  de forma que a operação resultante no tempo  $t_1$  é equivalente a

$$U(t_1) = \exp\left[-i\left(\frac{B_1}{2}\sigma_1^z t_1 + \frac{B_2}{2}\sigma_2^z t_1\right)\right] = \left(I_1\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\sigma_1^z\right) \otimes \left(I_2\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\sigma_2^z\right), \quad (4.10)$$

que representa a parte

$$U_1^z\left(-\frac{\pi}{2}\right)U_2^z\left(-\frac{\pi}{2}\right) \quad (4.11)$$

do operador  $U_{XOR}$  da Eq. (4.6). Entre os tempos  $t_1$  e  $t_2$  ligamos os campos  $J(t)$  no sítio de ambos os qubits na direção  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$ , visto que  $(\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+) = \frac{\sigma_1^x \sigma_2^x}{2} + \frac{\sigma_1^y \sigma_2^y}{2}$  com  $\sigma_j^\pm = (\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y)/2$ . Impondo que  $t_2 = t_1 + \frac{\pi}{2J}$  a operação resultante no tempo  $t_2$  é equivalente à rotação do operador  $U_{12}(\frac{\pi}{2})$ . Assim, continuamos ligando e desligando os campos, ajustando os tempos da Fig. (4.1) em função dos campos, de forma a reproduzir integralmente o operador  $U_{XOR}$ . Os tempos, então, são definidos como  $t_1 = \pi/(2B)$ ,  $t_2 = t_1 + \pi/(2J)$ ,  $t_3 = t_2 + \pi/(2B)$ ,  $t_4 = t_3 + \pi/(2J)$ ,  $t_5 = t_4 + \pi/(B)$ ,  $t_6 = t_5 + \pi/(2B)$  e  $t_{XOR} = t_6 + \pi/(2B)$ , onde  $t_{XOR}$  é o tempo total de operação da porta lógica XOR.

O que se pode notar de imediato é que o tempo de aplicação da porta pode ser maior caso as energias de acoplamentos sejam menores, ou vice-versa. Vejamos, por exemplo, o intervalo  $0 \rightarrow t_1$ : podemos transformar  $t_1 \rightarrow t'_1$  e  $B \rightarrow B'$  de forma que o operador  $U(t_1) = U(t'_1)$ . Para tal, o que se faz necessário é que o produto *tempo*  $\times$  *campo* não se altere, ou seja,

$$\int_0^{t_1} B(t)dt = \int_0^{t'_1} B'(t)dt = \frac{\pi}{2}. \quad (4.12)$$

Nota-se, então, que não necessariamente precisamos supor pulsos retangulares de forma que podemos aplicar outras formas de pulso que sejam mais realistas dependendo do sistema físico específico em questão. Visto isso, a fim de estimarmos a evolução temporal do nosso Hamiltoniano, Eq. (4.4), aplicamos o método numérico conhecido como Integrador Unitário [9], descrito abaixo, o qual nos possibilita resolver a equação de Liouville-von Neumann para um Hamiltoniano dependente do tempo.

## 4.2 Integrador unitário

Uma solução formal da equação de Liouville-von Neumann, Eq. (3.12), pode ser construída observando que para um incremento de tempo infinitesimal  $\delta t$ , escrevemos o operador densidade reduzido como sendo

$$\rho(t + \delta t) = U(t, t + \delta t)\rho(t)U^\dagger(t, t + \delta t), \quad (4.13)$$

de forma que numa aproximação até primeira ordem no tempo escrevemos

$$U(t, t + \delta t) = e^{-i\delta t H(t)} \approx 1 - i\delta t H(t). \quad (4.14)$$

O operador evolução para um intervalo de tempo  $T$  pode ser construído por uma sucessão de operadores infinitesimais:

$$U(t, t + T) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \prod_{n=0}^{T/\delta t} e^{-i\delta t H(t+n\delta t)} \quad (4.15)$$

cuja expressão é, então, usada como um guia para o desenvolvimento de uma solução aproximada. A idéia é substituir o operador evolução infinitesimal por uma aproximação da forma

$$U(t, t + N\tau) = \prod_{n=0}^{N-1} \bar{U}(t + n\tau, \tau), \quad (4.16)$$

onde a matriz unitária  $\bar{U}(t, \tau)$  é uma aproximação de  $U(t, t + \tau)$  até a ordem  $\kappa$  no tempo:

$$\bar{U}(t, \tau) = U(t, t + \tau) + O(\tau^\kappa). \quad (4.17)$$

Sendo assim, é necessário que a evolução temporal exata dada pelo operador  $U(t, t + \tau)$ ,

$$\rho(t + \tau) = U(t, t + \tau)\rho(t)U^\dagger(t, t + \tau), \quad (4.18)$$

seja equivalente, até a ordem  $\kappa$  no tempo, à evolução temporal dada pelo operador aproximado  $\bar{U}(t, \tau)$ :

$$\bar{\rho}(t + \tau) = \bar{U}(t, \tau)\rho(t)\bar{U}^\dagger(t, \tau). \quad (4.19)$$

A fim de calcularmos o operador  $\bar{U}$ , visto que toda matriz unitária pode ser expressa como a exponencial de uma matriz anti-hermitiana, é conveniente para o nosso propósito escrevermos onde  $A$  é uma matriz hermitiana que é calculada através da expansão em série de Taylor do operador  $\rho(t + \tau)$  em torno de  $\tau = 0$  até a ordem  $\kappa$  no tempo.

Pela solução formal da equação de Liouville, facilmente se verifica que até primeira ordem

$$U(\tau) = e^{-i\tau H(0)} + O(\tau^2) \quad (4.20)$$

e, para ordens superiores, onde é necessário considerar outros termos da expansão, encontra-se a seguinte aproximação para  $A$  [10]:

até segunda ordem:

$$A = H(t) + \frac{1}{2!}\tau H'(t) \quad (4.21)$$

e até terceira ordem:

$$A = H(t) + \frac{1}{2!}\tau H'(t) + \frac{1}{3!}\tau^2 H''(t) + \frac{i}{12}\tau^2 [H(t), H'(t)]. \quad (4.22)$$

Felizmente, para usar estas expressões no calculo de  $U$ , não se faz necessário exponenciar uma matriz geral  $n \times n$ . Nós estamos livres para aproximar  $A$  de forma tal que a aproximação seja consistente com a ordem do método, e esta liberdade pode ser usada para simplificar a construção de  $U(t, \tau)$ .

Assim, consideremos o conjunto de todas as matrizes Hermitianas de traço nulo que, denotaremos por  $\mathbf{H}(n)$ , as quais constituem um espaço vetorial de dimensão  $(n^2 - 1)$  visto que um elemento da diagonal principal pode ser escrito como combinação linear dos outros  $(n - 1)$  elementos da mesma diagonal através do vínculo

$$\text{tr}H = H_1 + H_2 + \dots + H_n = 0 \quad \rightarrow \quad H_1 = -(H_2 + \dots + H_n), \quad (4.23)$$

sendo os  $H_n$ 's os elementos da diagonal principal da matriz  $H$ . Seja um conjunto de matrizes,  $\{\lambda_k\}$ , uma base para  $\mathbf{H}$ . É facil verificar que

$$[x, y] \in \mathbf{H}(n), \quad \forall x, y \in \mathbf{H}(n), \quad (4.24)$$

de forma que podemos escrever, para algumas constantes  $f_{ijk}$ , que

$$[\lambda_i, \lambda_j] = 2i \sum_k f_{ijk} \lambda_k. \quad (4.25)$$

Além do mais, podemos escolher nossa base com normalização

$$\text{tr} \lambda_i \lambda_j = 2\delta_{ij}. \quad (4.26)$$

Agora, desde que  $\{\lambda_k\}$  seja uma base para  $\mathbf{H}(n)$ , qualquer que seja  $A \in \mathbf{H}(n)$  pode ser escrito como

$$A = \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k \lambda_k. \quad (4.27)$$

Por substituição direta de  $A$  na equação abaixo, calculamos  $\alpha_k$ :

$$\frac{1}{2} \text{tr} A \lambda_k = \frac{1}{2} \text{tr} \left( \sum_{j=1}^{n^2-1} \alpha_j \lambda_j \lambda_k \right) = \frac{1}{2} \left( \sum_{j=1}^{n^2-1} \alpha_j \text{tr}(\lambda_j \lambda_k) \right) = \alpha_k, \quad (4.28)$$

visto que nossa base é normalizada conforme a Eq. (4.26).

É possível, então, escolhermos  $\{\lambda_k\}$  de tal forma que  $e^{-ia\lambda_k}$  pode ser facilmente calculado. Assim, escrevemos

$$e^{-i\tau A} = \exp \left\{ -i\tau \sum_{k=0}^{n^2-1} \alpha_k \lambda_k \right\}, \quad (4.29)$$

que é o nosso operador de evolução temporal. O que fazemos então, é reescrever a equação acima de forma mais conveniente,

$$e^{-i\tau A} = \prod_{k=1}^{n^2-1} e^{-i\tau \beta_k \lambda_k} + O(\tau^{l+1}), \quad (4.30)$$

para algum  $\beta_k$  que dependerá de  $\alpha_j$  de forma complicada, visto que os  $\lambda_k$  não necessariamente comutam entre si. Tal transformação é feita de forma que obtemos um resultado exato para o operador  $e^{-i\tau A}$  até a ordem de grandeza desejada. Sendo assim, a fim de encontrarmos uma forma fechada para  $\beta_k$ , até a ordem de grandeza desejada, usaremos a Eq. (4.28) para expandir o lado direito e o lado esquerdo da Eq. (4.30). Para um integrador de ordem  $l$ , nós podemos escrever  $\alpha_k$  como

$$\alpha_k = \sum_{j=0}^{l-1} \tau^j \alpha_k^{(j)} \quad (4.31)$$

e, similarmente,

$$\beta_k = \sum_{j=0}^{l-1} \tau^j \beta_k^{(j)} + O(\tau^l). \quad (4.32)$$

Usamos a Eq. (4.31) do lado esquerdo da Eq. (4.30) obtemos

$$\begin{aligned} e^{-iA\tau} &= 1 - iA\tau - \frac{A^2\tau^2}{2!} + \frac{iA^3\tau^3}{3!} + \dots, \\ e^{-iA\tau} &= 1 - i\tau \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k \lambda_k - \frac{\tau^2}{2!} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} \alpha_k \alpha_{k'} \lambda_k \lambda_{k'} + \frac{i\tau^3}{3!} \sum_{k,k',k''=1}^{n^2-1} \alpha_k \alpha_{k'} \alpha_{k''} \lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''} = \\ &= 1 - i\tau \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \lambda_k - i\tau^2 \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(1)} \lambda_k - i\tau^3 \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(2)} \lambda_k + \\ &- \frac{\tau^2}{2!} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} - \frac{\tau^3}{2} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} \left( \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(1)} + \alpha_k^{(1)} \alpha_{k'}^{(0)} \right) \lambda_k \lambda_{k'} + \frac{i\tau^3}{3!} \sum_{k,k',k''=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \alpha_{k''}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Expandimos, também, o lado direito da Eq. (4.30) em série de Taylor:

$$\prod_{k=1}^{n^2-1} e^{-i\tau\beta_k\lambda_k} = \prod_{k=1}^{n^2-1} \left\{ 1 - i\beta_k\lambda_k\tau - \frac{1}{2!}\beta_k^2\lambda_k^2\tau^2 + \frac{i}{3!}\beta_k^3\lambda_k^3\tau^3 \right\}$$

e transformaremos o produtório acima numa somatória. Substituiremos, então, a Eq. (4.32), de forma que possamos calcular  $\beta_k$  em função de  $\alpha_k$ , comparando o resultado da Eq. (4.33) com o resultado obtido.

Para tal observamos um produtório geral:

$$\begin{aligned} & (1 + a_1\tau + b_1\tau^2 + c_1\tau^3)(1 + a_2\tau + b_2\tau^2 + c_2\tau^3) = \\ & = 1 + a_2\tau + b_2\tau^2 + c_2\tau^3 + a_1\tau + a_1a_2\tau^2 + a_1b_2\tau^3 + b_1\tau^2 + b_1a_2\tau^3 + c_1\tau^3 \end{aligned}$$

e, novamente,

$$\begin{aligned} & (1 + a_1\tau + b_1\tau^2 + c_1\tau^3)(1 + a_2\tau + b_2\tau^2 + c_2\tau^3)(1 + a_3\tau + b_3\tau^2 + c_3\tau^3) = \\ & = (1 + a_2\tau + b_2\tau^2 + c_2\tau^3 + a_1\tau + a_1a_2\tau^2 + a_1b_2\tau^3 + b_1\tau^2 + b_1a_2\tau^3 + c_1\tau^3)(1 + a_3\tau + b_3\tau^2 + c_3\tau^3) = \\ & = 1 + a_3\tau + b_3\tau^2 + c_3\tau^3 + a_2\tau + a_2a_3\tau^2 + a_2b_3\tau^3 + b_2\tau^2 + b_2a_3\tau^3 + c_2\tau^3 + a_1\tau + a_1a_3\tau^2 + a_1b_3\tau^3 + \\ & \quad + a_1a_2\tau^2 + a_1a_2a_3\tau^3 + a_1b_2\tau^3 + b_1\tau^2 + b_1a_3\tau^3 + b_1a_2\tau^3 + c_1\tau^3. \end{aligned}$$

De forma ordenada, escrevemos o resultado da produtória como sendo

$$\begin{aligned} & 1 + a_1\tau + a_2\tau + a_3\tau + b_1\tau^2 + b_2\tau^2 + b_3\tau^2 + c_1\tau^3 + c_2\tau^3 + c_3\tau^3 + a_1a_2\tau^2 + a_1a_3\tau^2 + \\ & \quad + a_2a_3\tau^2 + a_1b_2\tau^3 + a_1b_3\tau^3 + a_2b_3\tau^3 + b_1a_2\tau^3 + b_1a_3\tau^3 + b_2a_3\tau^3 + a_1a_2a_3\tau^3 = \\ & = 1 + \tau \left\{ \sum_k a_k \right\} + \tau^2 \left\{ \sum_k b_k + \sum_{k'>k} a_k a_{k'} \right\} + \tau^3 \left\{ \sum_k c_k + \sum_{k'>k} b_k a_{k'} + \sum_{k''>k'>k} a_k a_{k'} a_{k''} \right\}. \end{aligned}$$

Sendo assim, podemos escrever o lado direito da Eq. (4.30) em termos de somatórias como sendo

$$1 - i\tau \sum_{k=1}^{n^2-1} \beta_k \lambda_k - \tau^2 \left[ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n^2-1} \beta_k^2 \lambda_k^2 + \sum_{k'>k}^{n^2-1} \beta_k \beta_{k'} \lambda_k \lambda_{k'} \right] + \\ + \tau^3 \left[ \frac{i}{6} \sum_{k=1}^{n^2-1} \beta_k^3 \lambda_k^3 + \frac{i}{2} \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^2 \beta_{k'} \lambda_k^2 \lambda_{k'}) + i \sum_{k''>k'>k}^{n^2-1} \beta_k \beta_{k'} \beta_{k''} \lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''} \right]. \quad (4.34)$$

Substituindo, então, a Eq. (4.32) na equação acima obtemos finalmente

$$\prod_{k=1}^{n^2-1} e^{-i\tau \beta_k \lambda_k} = 1 - i\tau \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k \beta_k^{(0)} - i\tau^2 \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k \beta_k^{(1)} - i\tau^3 \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k \beta_k^{(2)} - \frac{\tau^2}{2} \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k^2 (\beta_k^{(0)})^2 - \\ - \tau^3 \sum_{k=1}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_k^{(1)} \lambda_k^2 - \tau^3 \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(1)} + \beta_k^{(1)} \beta_{k'}^{(0)}) \lambda_k \lambda_{k'} - \tau^2 \sum_{k'>k}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} + \\ + \frac{i\tau^3}{6} \sum_{k=1}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^3 \lambda_k^3 + \frac{i\tau^3}{2} \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^2 \beta_{k'}^{(0)} \lambda_k^2 \lambda_{k'} + i\tau^3 \sum_{k''>k'>k}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \beta_{k''}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}. \quad (4.35)$$

Agora estamos em vias de calcularmos  $\beta_k$  em função de  $\alpha_k$  igualando as potências de  $\tau$  da Eq. (4.33) e Eq. (4.35). Assim,

$$-i\tau \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \lambda_k = -i\tau \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k \beta_k^{(0)}, \quad (4.36)$$

$$-i\tau^2 \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(1)} \lambda_k - \frac{\tau^2}{2} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} = -i\tau^2 \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k \beta_k^{(1)} - \frac{\tau^2}{2} \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k^2 (\beta_k^{(0)})^2 - \tau^2 \sum_{k>k'}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'}, \quad (4.37)$$

$$-i\tau^3 \sum_{k=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(2)} \lambda_k - \frac{\tau^3}{2} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} (\alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(1)} + \alpha_k^{(1)} \alpha_{k'}^{(0)}) \lambda_k \lambda_{k'} + \frac{i\tau^3}{6} \sum_{k,k',k''=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \alpha_{k''}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''} = \\ = -i\tau^3 \sum_{k=1}^{n^2-1} \lambda_k \beta_k^{(2)} - \tau^3 \sum_{k=1}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_k^{(1)} \lambda_k^2 - \tau^3 \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(1)} + \beta_k^{(1)} \beta_{k'}^{(0)}) \lambda_k \lambda_{k'} + \\ + \frac{i\tau^3}{6} \sum_{k=1}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^3 \lambda_k^3 + \frac{i\tau^3}{2} \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^2 \beta_{k'}^{(0)} \lambda_k^2 \lambda_{k'} + i\tau^3 \sum_{k''>k'>k}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \beta_{k''}^{(0)} \lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}. \quad (4.38)$$

Multiplicando ambos os lados das equações acima por  $\lambda_p$  e usando a Eq. (4.26) obtemos

$$\alpha_p^{(0)} = \beta_p^{(0)}, \quad (4.39)$$

$$-2i\alpha_p^{(1)} - \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'}] = -2i\beta_p^{(1)} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^2 \text{tr} \lambda_p \lambda_k^2 - \sum_{k>k'}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'}], \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} -2i\alpha_p^{(2)} - \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} (\alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(1)} + \alpha_k^{(1)} \alpha_{k'}^{(0)}) \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'}] + \frac{i}{6} \sum_{k \neq k' \neq k''=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \alpha_{k''}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}] = \\ = -2i\beta_p^{(2)} - \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(1)} + \beta_k^{(1)} \beta_{k'}^{(0)}) \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'}] + \frac{i}{2} \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^2 \beta_{k'}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k^2 \lambda_{k'}] \\ + i \sum_{k''>k'>k}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \beta_{k''}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}], \end{aligned} \quad (4.41)$$

ou, de forma mais resumida, podemos escrever

$$\beta_p^{(0)} = \alpha_p^{(0)}, \quad (4.42)$$

$$\beta_p^{(1)} = \alpha_p^{(1)} + \frac{i}{4} \sum_{k'>k}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k, \lambda_{k'}], \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} \beta_p^{(2)} = \alpha_p^{(2)} - \frac{i}{4} \sum_{k,k'=1}^{n^2-1} (\alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(1)} + \alpha_k^{(1)} \alpha_{k'}^{(0)}) \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'}] - \frac{1}{12} \sum_{k \neq k' \neq k''=1}^{n^2-1} \alpha_k^{(0)} \alpha_{k'}^{(0)} \alpha_{k''}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}] + \\ + \frac{i}{2} \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(1)} + \beta_k^{(1)} \beta_{k'}^{(0)}) \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'}] + \frac{1}{4} \sum_{k'>k}^{n^2-1} (\beta_k^{(0)})^2 \beta_{k'}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k^2 \lambda_{k'}] + \\ + \frac{1}{2} \sum_{k''>k'>k}^{n^2-1} \beta_k^{(0)} \beta_{k'}^{(0)} \beta_{k''}^{(0)} \text{tr} \lambda_p[\lambda_k \lambda_{k'} \lambda_{k''}]. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Sendo assim, podemos agora calcular qualquer operação unitária  $U$  cujo Hamiltoniano tenha traço nulo, dependente ou não do tempo, até a terceira ordem de grandeza de  $\tau$ . É claro que

podemos continuar ainda mais a expansão para obter equações de ordens superiores, mas já tendo as equações até a terceira ordem podemos estimar um passo que façam os resultados de ordem dois e três convergirem numa única resposta, verificando assim sua exatidão.

### 4.3 Operação da porta lógica quântica XOR

A fim de finalmente calcularmos a evolução temporal da porta lógica quântica XOR, temos que calcular uma base de matrizes que respeitem as propriedades impostas pelo método numérico Integrador Unitário. Com essa finalidade, expandimos nosso Hamiltoniano  $H_{XOR}$ , Eq. (4.4), já observando quais são os campos necessários para a operação da porta lógica, conforme a Tabela (4.5),

$$H_{XOR}(t) = -\frac{\hbar}{2} \left\{ \vec{B}_{1x}(t)\vec{\sigma}_{1x} + \vec{B}_{1z}(t)\vec{\sigma}_{1z} + \vec{B}_{2x}(t)\vec{\sigma}_{2x} + \vec{B}_{2z}(t)\vec{\sigma}_{2z} \right\} + \frac{\hbar}{2} \left\{ \vec{J}(t)\vec{\sigma}_{xx} + \vec{J}(t)\vec{\sigma}_{yy} \right\} \quad (4.45)$$

onde

$$\begin{array}{lll} \sigma_{1x} = \sigma_x \otimes I_2, & \sigma_{1y} = \sigma_y \otimes I_2, & \sigma_{1z} = \sigma_z \otimes I_2, \\ \sigma_{2x} = I_1 \otimes \sigma_x, & \sigma_{2y} = I_1 \otimes \sigma_y, & \sigma_{2z} = I_1 \otimes \sigma_z, \\ \sigma_{xx} = \sigma_x \otimes \sigma_x, & \sigma_{xy} = \sigma_x \otimes \sigma_y, & \sigma_{xz} = \sigma_x \otimes \sigma_z, \\ \sigma_{yx} = \sigma_y \otimes \sigma_x, & \sigma_{yy} = \sigma_y \otimes \sigma_y, & \sigma_{yz} = \sigma_y \otimes \sigma_z, \\ \sigma_{zx} = \sigma_z \otimes \sigma_x, & \sigma_{zy} = \sigma_z \otimes \sigma_y, & \sigma_{zz} = \sigma_z \otimes \sigma_z, \end{array}$$

sendo os  $\sigma$ 's dados pelas matrizes de Pauli e  $I$  é a identidade. Nem todos os elementos definidos acima aparecem no nosso Hamiltoniano dado pela Eq. (4.45), mas tais operadores geram uma base completa para as matrizes  $4 \times 4$  de traço nulo, o que nos possibilita então aplicar o método do Integrador Unitário a fim de calcularmos a evolução.

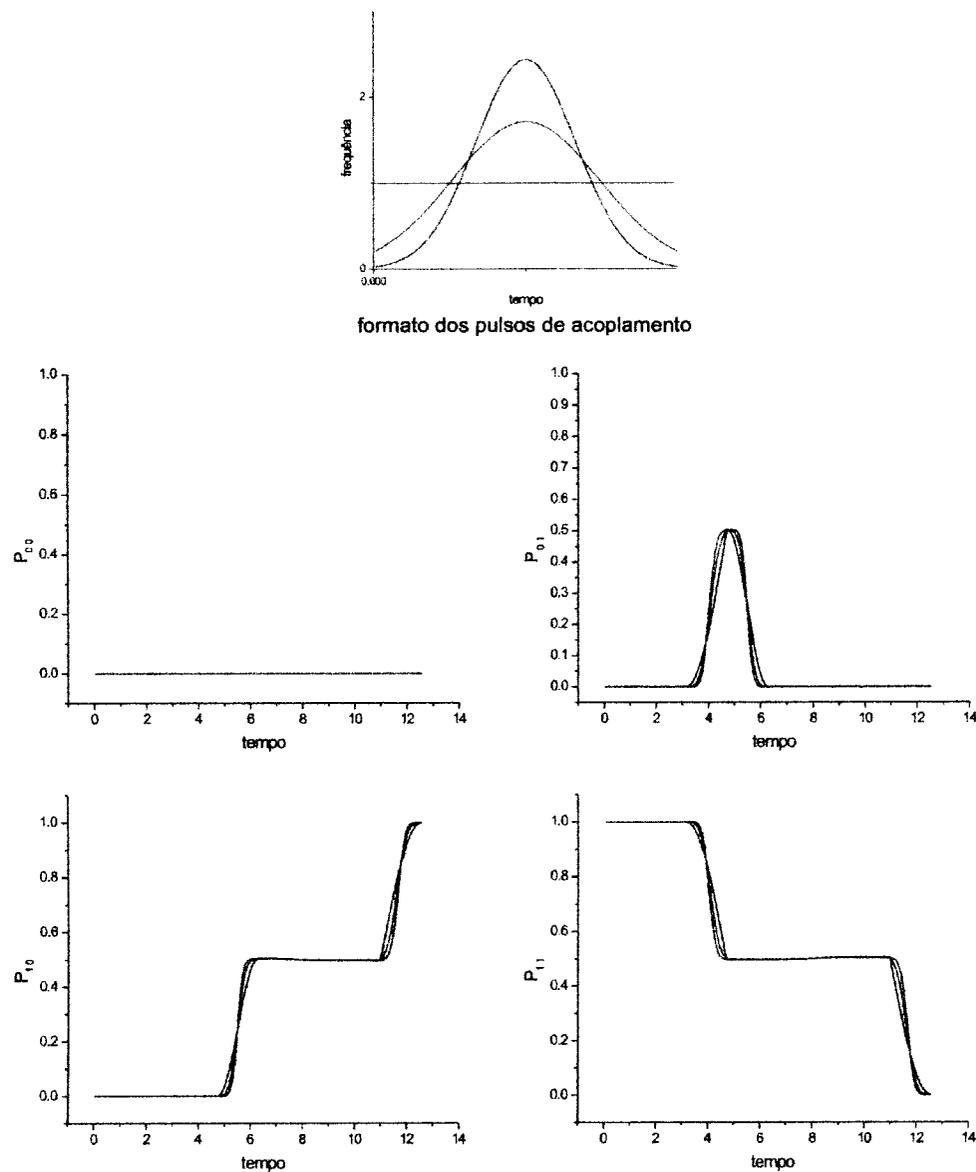
Calculamos  $\beta$ , Eq. (4.32), até terceira ordem no tempo através do cálculo do operador  $A$ , Eq. (4.22), que é uma aproximação do nosso Hamiltoniano  $H_{XOR}$ , e geramos o operador definido pela Eq. (4.30). Tal operador, como visto anteriormente, representa o operador evolução temporal com exatidão até a ordem desejada.

Tendo tudo em mãos, então, ilustramos a dinâmica da porta lógica genérica XOR na Fig. (4.2). Para tal, determinamos a população dos quatro elementos da base computacional como função do tempo, isto é,  $P_{ij}(t) = \langle ij | \rho(t) | ij \rangle$  com  $i, j = 0, 1$  para a condição inicial  $\rho(0) = |11\rangle \langle 11|$ . Os parâmetros, como dito anteriormente, são definidos  $B_x(t) = B_z(t) = J(t) \equiv B(t)$  onde as frequências são tais que

$$\int_0^t B(t) dt = \theta \quad \text{para um operador} \quad U(\theta) = e^{-i\theta/\hbar} \quad (4.46)$$

da Eq. (4.6). Sendo assim, tivemos a liberdade de trabalhar com formas diferentes de pulsos. Além do pulso quadrado, descrito pela função Heaviside, utilizamos, também, dois pulsos gaussianos com frequências distintas, de forma que podemos observar como as populações variam nestas diferentes circunstâncias. Novamente, vale ressaltar, que em todos os três casos a porta lógica é aplicada com sucesso. Apesar dos campos serem distintos, a quantidade de energia fornecida ao sistema é a mesma, sendo esta somente distribuída de forma diferente. O passo estimado como tendo a melhor relação precisão/tempo computacional foi o de  $\tau = 0.01$  e está escrito em unidades de  $(1/B)$  sendo  $B$  a unidade do campo.

**POPULAÇÕES DURANTE A OPERAÇÃO  
DA PORTA LÓGICA QUÂNTICA XOR**



**Figura 4.2:** Dinâmica da porta lógica quântica XOR para o caso de iguais energias de acoplamento, e para três formas diferentes de pulsos (i) quadrado (preto) (ii) e (iii) gaussiano (vermelho e verde). O tempo está na escala de  $1/B$ . A condição inicial é  $\rho(0) = |11\rangle\langle 11|$ .

A população dos quatro elementos da base computacional como função do tempo é definido como  $P_{ij}(t) = \langle ij | \rho(t) | ij \rangle$  com  $i, j = 0, 1$ . Como se pode observar, nos gráficos anteriores, o estado final após a operação da porta lógica é  $|\Psi\rangle = |10\rangle$ , visto que no tempo final a população  $P_{10} = 1$ .

A dinâmica de cada população é levemente diferente dependendo da forma do pulso (preto, vermelho ou verde) e isto é devido ao fato dos qubits se portarem de maneira diferente se a energia do campo for distribuída no tempo de forma gaussiana ou de forma constante, como no caso do pulso quadrado. No início de um pulso gaussiano, por exemplo, os qubits praticamente não interagem com o campo. Tal efeito pode ser observado através das variações das populações em cada um dos gráficos onde se constata que os qubits, inicialmente, interagem mais intensamente com o campo com maior energia inicial (pulso preto) do que os com energia inicial menor (pulsos vermelho e verde).

Para efetuar a porta lógica com sucesso é necessário que a energia total transferida ao qubit seja igual em todos os casos, de forma que no decorrer dos pulsos as diferenças iniciais sejam compensadas, ou seja, desde que as áreas sob as curvas dos pulsos da Fig. (4.2) sejam iguais, estaremos sempre fornecendo a mesma energia ao sistema e efetuaremos a porta lógica quântica com sucesso. É fácil observar no caso do pulso de frequência constante que podemos diminuir a energia do mesmo pela metade desde que o tempo de duração seja dobrado

$$e^{-iBt/\hbar} = e^{-i\frac{B}{2}2t/\hbar}.$$

Idealmente podemos, então, imaginar infinitas formas diferentes de pulso que, apesar de possuírem dinâmicas distintas, efetuarão sempre a porta lógica com sucesso.

O importante disso tudo, é que quando acoplarmos nosso Hamiltonian  $H_{XOR}$  a um banho de osciladores harmônicos a fim de estimarmos a decoerência e a dissipação, cada pulso poderá resultar numa dinâmica distinta para cada população e um resultado final distinto de forma que poderemos, então, estimar qual pulso é menos sensível às perturbações externas.

---

## Decoerência e Dissipação Durante a Operação da Porta Lógica Quântica XOR

---

A metodologia que aplicamos para solucionar nosso Hamiltoniano geral, Eq. (3.3), se baseia na teoria de integrais de trajetória desenvolvida por Feynman na década de quarenta, a qual proporciona uma ferramenta poderosa na solução de problemas quânticos. Aplicações numéricas deste método cresceram significativamente nos últimos anos devido ao maior poder de processamento dos computadores, e freqüentemente proporcionam resultados que dificilmente seriam obtidos por outros métodos. As integrais de trajetórias oferecem uma vantagem única para problemas do tipo sistema-banho visto que nos permite calcular a somatória infinita do banho analiticamente na forma de um funcional de influência.

Inicialmente nessa seção, faremos uma breve introdução sobre integrais de trajetória de Feynman, como a usamos para resolver a dinâmica de sistemas quânticos, e o porquê deste método necessitar de alto poder de processamento. Em seguida expomos o método numérico conhecido como *Propagador quase adiabático*, que é baseado na idéia das integrais de trajetória, e finalmente calculamos a evolução do operador densidade de energia considerando decoerência e dissipação.

## 5.1 Integrais de trajetória de Feynman

O Hamiltoniano geral para o sistema-banho pode ser escrito como

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_s^2}{2m_0} + V(\hat{s}) + \sum_{i=1}^F c_i \hat{s} \hat{Q}_i + \sum_{i=1}^F \frac{\hat{P}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{Q}_i^2, \quad (5.1)$$

onde  $s$  é a coordenada de interesse da partícula quântica a qual é descrita por um potencial geralmente não linear, e os osciladores harmônicos de coordenadas  $Q_i$  descrevem, através de constantes de acoplamento, os efeitos do ambiente. A evolução de observáveis pertinentes ao sistema de interesse é expressa em termos do operador densidade reduzido,

$$\rho_s(s'', s'; t) \equiv Tr_{banho} \langle s'' | e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{-iHt/\hbar} | s' \rangle, \quad (5.2)$$

onde o traço é calculado sobre todos os graus de liberdade  $\{Q_i\}$  e  $\rho(0)$  é o operador densidade inicial.

A representação em termos das integrais de trajetórias de Feynman é obtida fatiando o tempo total  $t$  em  $N$  pedaços de tamanho  $\Delta t$  de forma que expressamos o operador de evolução temporal como um produto

$$e^{-iHt/\hbar} = (e^{-iH\Delta t/\hbar})^N, \quad (5.3)$$

de forma que o operador densidade é escrito

$$\rho_s(s'', s'; t) = Tr_{banho} \langle s'' | e^{-iH\Delta t/\hbar} e^{-iH\Delta t/\hbar} \dots e^{-iH\Delta t/\hbar} \rho(0) e^{iH\Delta t/\hbar} e^{iH\Delta t/\hbar} \dots e^{iH\Delta t/\hbar} | s' \rangle. \quad (5.4)$$

Inserindo conjuntos completos do tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds |s\rangle \langle s| = I, \quad (5.5)$$

entre cada par de exponenciais, construímos a expressão para as integrais de trajetória

$$\begin{aligned} \rho_s(s'', s'; N\Delta t) = & Tr_{banho} \int ds_0^+ \int ds_1^+ \dots \int ds_{N-1}^+ \int ds_0^- \int ds_1^- \dots \int ds_{N-1}^- \langle s'' | e^{-iH\Delta t/\hbar} | s_{N-1}^+ \rangle \times \\ & \langle s_{N-1}^+ | e^{-iH\Delta t/\hbar} | s_{N-2}^+ \rangle \dots \langle s_1^+ | e^{-iH\Delta t/\hbar} | s_0^+ \rangle \langle s_0^+ | \rho(0) | s_0^- \rangle \langle s_0^- | e^{iH\Delta t/\hbar} | s_1^- \rangle \times \\ & \langle s_1^- | e^{iH\Delta t/\hbar} | s_2^- \rangle \dots \langle s_{N-1}^- | e^{iH\Delta t/\hbar} | s' \rangle, \end{aligned} \quad (5.6)$$

sendo que a sequência  $s_0^+, s_1^+, \dots, s_N^+$  e  $s_0^-, s_1^-, \dots, s_N^-$  (onde  $s_N^+ \equiv s''$  e  $s_N^- \equiv s'$ ) define os caminhos do sistema para frente e para trás no tempo. Vale ressaltar que esta equação é exata para qualquer valor de  $N$ .

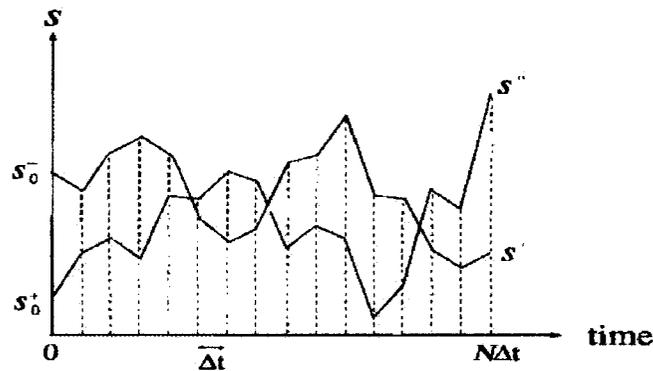


Figura 5.1: Representação da integral de trajetória do operador densidade de energia reduzido, Eq. (5.6).

Tradicionalmente, a fim de resolver a dinâmica do sistema, o operador evolução é separado na sua parte cinética  $K_s$  e potencial  $(H - K_s)$ , de forma que cada propagador é escrito

$$\langle s_{k''} | e^{-iH\Delta t/\hbar} | s_{k'} \rangle \approx \langle s_{k''} | e^{-i(H-K_s)\Delta t/2\hbar} e^{-iK_s\Delta t/\hbar} e^{-i(H-K_s)\Delta t/2\hbar} | s_{k'} \rangle. \quad (5.7)$$

Pelo fato do operador energia cinética não comutar com o termo potencial do Hamiltoniano, a última equação é válida somente no limite em que o passo  $\Delta t$  tende a zero. Nessas circunstâncias, o número de caminhos possíveis para a dinâmica do operador densidade de energia reduzido é grande, o que impossibilita o cálculo para tempos longos, visto que o tempo de processamento computacional é tanto maior quanto maior o tempo total da dinâmica.

Com o intuito de tornar o método viável também para o caso das dinâmicas de longo tempo, Makri [11] desenvolveu o método numérico conhecido como QUAPI (Quasiadiabatic Propagator Path Integral) particionando o Hamiltoniano num operador  $H_s$  (referente ao sistema) mais  $H_b$  (referente ao banho) de forma a resolver iterativamente a Eq. (5.6). É este método, explicado abaixo, que usamos para calcular a dinâmica da porta lógica quântica XOR perturbada.

## 5.2 Propagador quase adiabático - QUAPI

A técnica usada para resolver a Eq. (5.6) se baseia em reescrever o Hamiltoniano da Eq. (5.1) na forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_s^2}{2m_0} + V_0(\hat{s}) + \sum_{i=1}^F \frac{\hat{P}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 \left( \hat{Q}_i - \frac{c_i \hat{s}}{m_i\omega_i^2} \right)^2 \quad (5.8)$$

onde  $V(\hat{s})$  é substituído por um potencial que age ao longo da trajetória adiabática, ou seja, a linha que minimiza a energia potencial em cada um dos valores das coordenadas do sistema

$$\hat{Q}_i(s) = c_i s / m_i \omega_i^2, \quad V_0(\hat{s}) = V(\hat{s}) - \sum_{i=1}^F \frac{c_i^2 \hat{s}^2}{2m_i \omega_i^2}, \quad (5.9)$$

de forma que o potencial harmônico de cada oscilador do banho é centralizado no ponto de menor energia para cada valor da coordenada  $s$ . Dividimos, então, o Hamiltoniano sistema-banho em duas partes

$$\hat{H} = \hat{H}'_Q + \hat{H}'_s \quad (5.10)$$

onde  $\hat{H}'_Q$  é a parte do Hamiltoniano oscilante deslocado adiabaticamente,

$$\hat{H}'_Q = \sum_{i=1}^F \frac{\hat{P}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_i^2 \left( \hat{Q}_i - \frac{c_i \hat{s}}{m\omega_i^2} \right)^2 \equiv \sum_{i=1}^F \hat{H}_i(\hat{Q}_i, \hat{P}_i, \hat{s}), \quad (5.11)$$

e  $\hat{H}'_s$  é a parte do Hamiltoniano do sistema reescalado com  $V(s)$  substituído por um potencial ao longo do caminho adiabático  $Q_i(s) = c_i \hat{s} / m\omega_i^2$ :

$$\hat{H}'_s = \frac{\hat{p}_s^2}{2m} + V(\hat{s}) - \sum_{i=1}^F \frac{c_i^2 \hat{s}^2}{2m\omega_i^2}. \quad (5.12)$$

Sendo assim, impondo este tipo de separação ao Hamiltoniano cada propagador da Eq. (5.6) é escrito como:

$$\langle s_{k''} | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | s_{k'} \rangle \approx \langle s_{k''} | e^{-i\hat{H}'_Q\Delta t/2\hbar} e^{-i\hat{H}'_s\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{H}'_Q\Delta t/2\hbar} | s_{k'} \rangle, \quad (5.13)$$

ou ainda, já projetando,

$$\langle s''_k | \exp(-i\hat{H}\Delta t/\hbar) | s_{k'} \rangle \approx \langle s''_k | \exp(-i\hat{H}'_s\Delta t/\hbar) | s_{k'} \rangle \prod_{i=1}^F \exp(-i\hat{H}'_i(s''_k)\Delta t/2\hbar) \exp(-i\hat{H}'_i(s_{k'})\Delta t/2\hbar). \quad (5.14)$$

O erro nesta equação está no fato de que a energia cinética do sistema e a função de acoplamento do sistema-banho não comutam, e este pode ser estimado expandindo os operadores em série de Taylor como mostramos no caso abaixo, onde  $A$  e  $B$  são dois operadores que não comutam:

$$e^{(A+B)t} = 1 + At + Bt + \frac{AA}{2}t^2 + \frac{AB}{2}t^2 + \frac{BA}{2}t^2 + \frac{BB}{2}t^2 + O(t^3) \quad (5.15)$$

$$e^A e^B = \left(1 + At + \frac{AA}{2}t^2\right) \left(1 + Bt + \frac{BB}{2}t^2\right) = 1 + At + Bt + \frac{AA}{2}t^2 + ABt^2 + \frac{BB}{2}t^2 + O(t^3). \quad (5.16)$$

Nesse caso, podemos ver que o erro na segunda ordem de grandeza é dado por  $[B, A]t^2/2$ , de forma que

$$e^{(A+B)t} = e^A e^B + [B, A]t^2/2 + O(t^3). \quad (5.17)$$

Num outro tipo de separação, equivalente a que usamos no nosso propagador, Eq. (5.13), verificamos que este é exato até segunda ordem de grandeza,

$$e^{(A+B)t} = 1 + At + Bt + \frac{AA}{2}t^2 + \frac{AB}{2}t^2 + \frac{BA}{2}t^2 + \frac{BB}{2}t^2 + O(t^3) \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} e^{\frac{A}{2}t} e^{Bt} e^{\frac{A}{2}t} &= \left(1 + \frac{A}{2}t + \frac{A^2}{8}t^2 + Bt + \frac{B^2}{2}t^2 + \frac{AB}{2}t^2\right) \left(1 + \frac{A}{2}t + \frac{A^2}{8}t^2\right) + O(t^3) = \\ &= 1 + At + Bt + \frac{AA}{2}t^2 + \frac{AB}{2}t^2 + \frac{BA}{2}t^2 + \frac{BB}{2}t^2 + O(t^3), \end{aligned} \quad (5.19)$$

e o erro é proporcional a

$$[B, [B, A]]t^3. \quad (5.20)$$

Sendo assim, por analogia, vemos que o erro devido à separação imposta ao nosso Hamiltoniano em questão é proporcional a

$$\sum_{i=1}^F \left[ \hat{p}_s^2, \left[ \hat{p}_s^2, \left( \hat{Q}_i - \frac{c_i \hat{s}}{m\omega_i^2} \right)^2 \right] \right] \Delta t^3, \quad (5.21)$$

onde o comutador interno na equação acima também é uma medida da não adiabaticidade do problema, ou seja, o propagador deduzido é exato (para qualquer valor de  $\Delta t$ ) se somente pontos no caminho adiabático,  $Q_i = c_i \hat{s} / m\omega_i^2$ , são relevantes.

Desta forma, a descrição física que emerge das equações acima é simples. O primeiro termo da direita (independente do banho) da Eq.(5.14), com  $\hat{H}'_s$  dado pela Eq. (5.12), é o propagador exato

para o movimento ao longo do caminho adiabático, e por este motivo esta parte do propagador sistema-banho corresponde a dinâmicas puramente adiabáticas. Efeitos não adiabáticos são inseridos no propagador da Eq.(5.14) pela produtória através do propagador deslocado do banho. É importante ressaltar que para problemas com alta não adiabacidade este fator de correção é preciso somente para pequenos  $\Delta t$ .

Sendo assim, podemos então calcular os elementos do operador densidade de energia reduzido substituindo o propagador da Eq. (5.14) na Eq. (5.6), de forma que

$$\begin{aligned} \rho_s(s'', s; N\Delta t) = & \int ds_0^+ \int ds_1^+ \dots \int ds_{N-1}^+ \int ds_0^- \int ds_1^- \dots \int ds_{N-1}^- \langle s'' | e^{-iH'_s \Delta t / \hbar} | s_{N-1}^+ \rangle \times \\ & \langle s_{N-1}^+ | e^{-iH'_s \Delta t / \hbar} | s_{N-2}^+ \rangle \dots \langle s_1^+ | e^{-iH'_s \Delta t / \hbar} | s_0^+ \rangle \langle s_0^+ | \rho(0) | s_{N-1}^+ \rangle \langle s_{N-1}^+ | e^{-iH'_s \Delta t / \hbar} | s_1^- \rangle \times \\ & \langle s_1^- | e^{-iH'_s \Delta t / \hbar} | s_2^- \rangle \dots \langle s_{N-1}^- | e^{-iH'_s \Delta t / \hbar} | s' \rangle I(s_0^+, s_1^+, \dots, s_{N-1}^+, s'', s_0^-, s_1^-, \dots, s_{N-1}^-, s'; \Delta t), \end{aligned} \quad (5.22)$$

onde

$$\begin{aligned} I(s_0^+, s_1^+, \dots, s_{N-1}^+, s'', s_0^-, s_1^-, \dots, s_{N-1}^-, s'; \Delta t) = & Tr_{bath} [e^{-iH'_Q(s'') \Delta t / 2\hbar} e^{-iH'_Q(s_{N-1}^+) \Delta t / 2\hbar} \dots \times \\ & e^{-iH'_Q(s_0^+) \Delta t / 2\hbar} \rho_{bath}(0) e^{iH'_Q(s_0^-) \Delta t / 2\hbar} \dots e^{iH'_Q(s_{N-1}^-) \Delta t / 2\hbar} e^{iH'_Q(s') \Delta t / 2\hbar}] \end{aligned} \quad (5.23)$$

é chamado de *funcional de influência* de Feynman-Vernon, e pode assim ser escrito visto que as variáveis do sistema podem, logicamente, ser evidenciadas sobre o traço no banho. No caso, o papel do funcional de influência no propagador é incluir as correções não adiabáticas à dinâmica exata do sistema ao longo do caminho adiabático e no contínuo ( $\Delta t \rightarrow 0$  e  $N \rightarrow \infty$ ). O funcional de influência foi calculado por Feynman and Vernon [12] e é escrito como

$$\begin{aligned} I = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [s^+(t') - s^-(t')] [\alpha(t' - t'') s^+(t'') - \alpha^*(t' - t'') s^-(t'')] \right. \\ \left. - \frac{i}{\pi \hbar} \int_0^t dt' J(\omega) [s^+(t')^2 - s^-(t')^2]\right\}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

onde  $\alpha(t)$  é a função resposta do banho:

$$\alpha(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[ \coth\left(\frac{\beta \omega \hbar}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right] \quad (5.25)$$

e  $J(\omega)$  é a densidade espectral do banho térmico. A densidade espectral nos fornece a densidade de energia dos acomplamentos com os graus de liberdade do banho. Se o meio ambiente consiste de

poucos graus de liberdade, como no caso de moléculas orgânicas,  $J(\omega)$  é dado por um função delta, um pico. Densidades espectrais mais amplas são características de meios macroscópicos (sólidos, líquidos, moléculas biológicas grandes), e são responsáveis por perdas quando esta interfere nas frequências características do sistema quântico.

Sendo assim, obtemos todas as condições necessárias para finalmente resolver a porta lógica quântica XOR incluindo dissipação e decoerência.

### 5.3 Cálculo da evolução da matriz densidade reduzida

Nesta parte de nosso trabalho, aplicaremos então o método numérico QUAPI para resolver a evolução temporal da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos que refletirão as perturbações referentes ao meio ambiente.

O Hamiltoniano em questão é então escrito como

$$H(t) = H_{XOR}(t) + H_{banho} + H_{int}^{x/z}, \quad (5.26)$$

onde

$$H_{XOR}(t) = -\frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^2 \vec{B}_j(t) \vec{\sigma}_j + \hbar \sum_{j \neq k} J(t) \sigma_j^+ \sigma_k^-, \quad (5.27)$$

$$H_{banho} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{P_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 Q_i^2 \right), \quad (5.28)$$

$$H_{int} = S^{x/z} \sum_{i=1}^N \gamma_i^{x/z} Q_i, \quad (5.29)$$

sendo  $S^{x/z} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_1^{x/z} + \sigma_2^{x/z})$ .

Visto que estamos interessados em investigar tanto o efeito de *bit-flip* assim como os erros embutidos nas fases dos qubits, nós incluímos no modelo dois tipos diferentes de interação. Inicialmente acoplamos a componente  $\sigma^x$  dos spins com o banho de osciladores de forma que as populações dos qubits são alteradas e posteriormente investigamos os erros nas fases dos qubits acoplando a componente  $\sigma^z$  dos spins ao meio ambiente. Tais efeitos são convenientemente modelados pela Eq. (5.29) onde  $\gamma_i^{x/z}$  é a constante de acoplamento do  $i$ -ésimo oscilador com o sistema e

os índices  $x/z$  denotam um *ou* outro tipo de interação. É importante notar que supomos aqui um acoplamento dos dois spins com o mesmo banho, o que implica que imprerivelmente os qubits estão acoplados entre si através do banho.

A fim de estudar a dinâmica do sistema é necessário definir as condições iniciais. É suposto que o sistema e o banho não estão correlacionados no tempo  $t=0$ , sendo estatisticamente independentes, de tal forma que o operador densidade inicial pode ser escrito como

$$\rho(0) = \rho_s(0) \otimes \rho_B(0), \quad (5.30)$$

onde  $\rho_s(0)$  é o operador densidade do sistema no tempo  $t=0$  e

$$\rho_B(0) = \frac{\exp(-H_{\text{banho}}/k_B T)}{\text{Tr} \exp(-H_{\text{banho}}/k_B T)} \quad (5.31)$$

é a distribuição de equilíbrio de um oscilador harmônico desacoplado à temperatura  $T$  e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Sendo assim, a evolução do sistema é então obtida através da soma de todos os graus de liberdade referentes ao banho, de forma que seus elementos de matriz podem ser expressos como

$$\tilde{\rho}(s'', s'; t) = \text{Tr}_{\text{banho}} \langle s'' | e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{iHt/\hbar} | s' \rangle. \quad (5.32)$$

Com a finalidade de aplicar o método numérico QUAPI, particionamos o Hamiltoniano conforme a Eq. (5.10) e escrevemos o operador densidade reduzido em termos das integrais de trajetória de Feynman:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(s'', s'; t) = & \int ds_0^+ \int ds_1^+ \dots \int ds_{N-1}^+ \int ds_0^- \int ds_1^- \dots \int ds_{N-1}^- \langle s'' | e^{-iH_0 \Delta t / \hbar} | s_{N-1}^+ \rangle \\ & \times \dots \langle s_1^+ | e^{-iH_{XOR} \Delta t / \hbar} | s_0^+ \rangle \langle s_0^+ | \rho(0) | s_0^- \rangle \langle s_0^- | e^{iH_{XOR} \Delta t / \hbar} | s_1^- \rangle \dots \langle s_{N-1}^- | e^{iH_{XOR} \Delta t / \hbar} | s' \rangle \\ & \times I(s_0^+, s_1^+, \dots, s_{N-1}^+, s'', s_0^-, s_1^-, \dots, s_{N-1}^-, s'; \Delta t), \end{aligned} \quad (5.33)$$

onde  $I(s_0^+, s_1^+, \dots, s_{N-1}^+, s'', s_0^-, s_1^-, \dots, s_{N-1}^-, s'; \Delta t)$  é o funcional de influência, Eq. (5.24), com

$$H'_Q = H - H_{XOR}. \quad (5.34)$$

As integrais da Eq. (5.33) podem ser efetuadas resolvendo independentemente cada um dos elementos da integral através do Integrador Unitário e o funcional de influência pode ser calculado

com a discretização quase adiabática, de forma que

$$I = \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^N \sum_{k'=0}^{k-1} (s_k^+ - s_k^-) (\eta_{kk'} s_{k'}^+ - \eta_{kk'}^* s_{k'}^-) \right], \quad (5.35)$$

onde  $s_N^+ = s''$  e  $s_N^- = s'$  e os coeficiente  $\eta_{kk'}$  podem ser obtidos [13] substituindo o caminho discretizado na equação de Feynman e Vernon, Eq. (5.24),

$$\eta_{kk'} = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \sin^2(\omega\Delta t/2) e^{-i\omega\Delta t(k-k')}, \quad 0 < k' < k < N, \quad (5.36)$$

$$\eta_{kk} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} (1 - e^{i\omega\Delta t}), \quad 0 < k < N, \quad (5.37)$$

$$\eta_{N0} = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \sin^2(\omega\Delta t/4) e^{-i\omega(t-\Delta t/2)}, \quad (5.38)$$

$$\eta_{00} = \eta_{NN} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} (1 - e^{-i\omega\Delta t/2}), \quad (5.39)$$

$$\eta_{k0} = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \sin(\omega\Delta t/4) \sin(\omega\Delta t/2) e^{-i\omega(k\Delta t - \Delta t/4)}, \quad 0 < k < N \quad (5.40)$$

$$\eta_{Nk} = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \sin(\omega\Delta t/4) \sin(\omega\Delta t/2) e^{-i\omega(t-k\Delta t - \Delta t/4)}, \quad 0 < k < N \quad (5.41)$$

onde aqui a densidade espectral para frequências negativas é definida como  $J(-\omega) = -J(\omega)$ . Este funcional de influência discretizado nada mais é do que a expressão obtida por Feynman e Vernon [12] onde os caminhos para diante e para trás consistem de segmentos constantes  $s$ ,  $s^\pm(t) = s_k^\pm$ ,  $(k - \frac{1}{2})\Delta t < t < (k + \frac{1}{2})\Delta t$ . Vale ressaltar e verificar que os coeficientes  $\eta_{kk'}$  dependem somente da diferença  $\Delta k = k - k'$  se  $k, k' \neq 0, N$  e a magnitude do mesmo diminui rapidamente à medida que  $\Delta k$  aumenta. Assim, a circunstância sugere que desprezemos na Eq. (5.35) os  $\eta_{kk'}$  cujo  $|k - k'|$  sejam maiores que um certo valor  $\Delta k_{max}$ .

A fim de deduzir um esquema para multiplicação tensorial, nós reescreveremos o funcional de influência, Eq. (5.35), como um produto de termos correspondentes a diferentes  $\Delta k$ :

$$I = \prod_{k=0}^N I_0(s_k^+, s_k^-) \prod_{k=0}^{N-1} I_1(s_k^+, s_k^-, s_{k+1}^+, s_{k+1}^-) \dots \prod_{k=0}^{N-\Delta k} I_{\Delta k}(s_k^+, s_k^-, s_{k+\Delta k}^+, s_{k+\Delta k}^-) \quad (5.42)$$

ou, escrito numa outra notação (que adotaremos de agora em diante),

$$I = \prod_{k=0}^N I_0(s_k^\pm) \prod_{k=0}^{N-1} I_1(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm) \dots \prod_{k=0}^{N-\Delta k} I_{\Delta k}(s_k^\pm, s_{k+\Delta k}^\pm), \quad (5.43)$$

onde

$$I_0(s_k^\pm) = \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} (s_k^+ - s_k^-) (\eta_{kk} s_k^+ - \eta_{kk}^* s_k^-) \right], \quad (5.44)$$

$$I_{\Delta k}(s_k^\pm, s_{k+\Delta k}^\pm) = \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} (s_{k+\Delta k}^+ - s_{k+\Delta k}^-) (\eta_{k+\Delta k, k} s_k^+ - \eta_{k+\Delta k, k}^* s_k^-) \right], \quad \Delta k \geq 1, \quad (5.45)$$

sendo tal equação idêntica à Eq. (5.35) para o caso que  $\Delta k$  tende a infinito, e se  $\Delta k_{max} \leq 1$  a dinâmica é Markoviana, embora efeitos dissipativos sejam levados em consideração.

A idéia central é que se descartarmos interações de *longo alcance* (com  $|k - k'| > \Delta k_{max}$ ), a integral de trajetória pode ser calculada pela multiplicação de um tensor de rank  $2\Delta k_{max}$ .

Na ausência do banho, a matriz densidade do sistema  $\rho_{red}(s_k^+, s_k^-; t) \equiv \rho_{red}(s_k^\pm)$  pode ser propagada no tempo  $\Delta t$  pela multiplicação matriz-vetor:

$$\rho_{red}(s_{k+1}^\pm; t + \Delta t) = \int ds_k^\pm K(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm) \rho_{red}(s_k^\pm; t), \quad (5.46)$$

onde

$$K(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm) = \langle s_{k+1}^+ | e^{-iH_{XOR}\Delta t/\hbar} | s_k^+ \rangle \langle s_k^- | e^{iH_{XOR}\Delta t/\hbar} | s_{k+1}^- \rangle. \quad (5.47)$$

Para o caso que  $\Delta k_{max} = 1$ , o funcional de influência adiciona uma modificação nesta expressão, de forma que escrevemos

$$\rho_{red}(s_N^\pm; N\Delta t) = A^{(1)}(s_N^\pm; N\Delta t) I_0(s_N^\pm), \quad (5.48)$$

onde o vetor  $A^{(1)}$  é propagado de acordo com

$$A^{(1)}(s_{k+1}^\pm; (k+1)\Delta t) = \int ds_k^\pm T^{(2)}(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm) A^{(1)}(s_k^\pm; k\Delta t), \quad (5.49)$$

cuja condição inicial é dada por

$$A^{(1)}(s_0^\pm; 0) = \langle s_0^+ | \rho_s(0) | s_0^- \rangle \quad (5.50)$$

e  $T^{(2)}$  é uma matriz de propagação

$$T^{(2)}(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm) = K(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm) I_0(s_k^\pm) I_1(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm). \quad (5.51)$$

Se  $N$  interações são efetuadas desta maneira, a matriz densidade é exatamente o resultado obtido pela Eq. (5.33) contabilizando somente  $\eta_{kk}$  e  $\eta_{k,k\pm 1}$ .

Em seguida, nós generalizaremos o esquema de multiplicação tensorial para um valor arbitrário de  $\Delta k_{max}$ . Define-se um tensor  $\mathbf{T}$  de dimensão  $2\Delta k_{max}$  como sendo

$$T^{2\Delta k_{max}}(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm, \dots, s_k^\pm, s_{k+2\Delta k_{max}-1}^\pm) = \prod_{n=k}^{k+\Delta k_{max}-1} I_0(s_n^\pm) I_1(s_n^\pm, s_{n+1}^\pm) I_2(s_n^\pm, s_{n+2}^\pm) \times \dots I_{\Delta k_{max}}(s_n^\pm, s_{n+\Delta k_{max}}^\pm) K(s_n^\pm, s_{n+1}^\pm) \quad (5.52)$$

e também definimos o que chamaremos de *tensor densidade reduzida*  $\mathbf{A}^{(\Delta k_{max})}$  com a condição inicial dada por

$$A^{(\Delta k_{max})}(s_0^\pm, s_1^\pm, \dots, s_{\Delta k_{max}-1}^\pm; 0) = \langle s_0^+ | \rho_s(0) | s_0^- \rangle, \quad (5.53)$$

onde o esquema de multiplicação tensorial pode ser escrito para um  $\Delta k_{max}$  arbitrário como sendo

$$A^{(\Delta k_{max})}(s_{k+\Delta k_{max}}^\pm, \dots, s_{k+2\Delta k_{max}-1}^\pm; (k + \Delta k_{max})\Delta t) = \int ds_k^\pm \int ds_{k+\Delta k_{max}-1}^\pm T^{(2\Delta k_{max})}(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm, \dots, s_k^\pm, s_{k+2\Delta k_{max}-1}^\pm) A^{(\Delta k_{max})}(s_k^\pm, \dots, s_{\Delta k_{max}-1}^\pm; k\Delta t), \quad (5.54)$$

de forma que finalmente os elementos da matriz densidade reduzida no tempo  $t = N\Delta t$  podem ser escritos como

$$\tilde{\rho}(s_N^\pm; N\Delta t) = A^{(\Delta k_{max})}(s_N^\pm, s_{N+1} = \dots = s_{N+\Delta k_{max}-1} = 0; N\Delta t) I_0(s_N^\pm). \quad (5.55)$$

Sendo assim, deste momento em diante somente precisamos, para resolver a evolução temporal do sistema incluindo dissipação e decoerência, calcular as integrais de  $\eta_{kk'}$  para um certo  $\Delta k_{max}$  visto que os elementos  $K(s_k^\pm, s_{k+1}^\pm)$ , Eq. (5.47), podem ser facilmente estimados usando o método do integrador unitário.

## 5.4 Decoerência e dissipação durante a operação da porta lógica quântica XOR

Tendo determinado o operador densidade reduzido através do método numérico QUAPI, nós investigaremos a influência do meio ambiente no nosso sistema. Nós supomos que os dois qubits

são idênticos e os campos externos são de mesmo tamanho, ou seja,  $B_1^x(t) = B_2^x(t) \equiv B^x(t)$  e  $B_1^z(t) = B_2^z(t) \equiv B^z(t)$  e ainda mais  $B^x(t) = B^z(t) = J(t)$ . Caracterizamos a densidade espectral do banho como sendo ôhmica, limitada por um decaimento exponencial. Este espectro simula as flutuações nos circuitos externos que geram erros nas junções de Josephson [8],

$$J^{x/z}(\omega) = \gamma^{x/z} \omega e^{-\omega/\omega_c}, \quad (5.56)$$

onde  $\gamma^{x/z}$  é a constante de acoplamento com o meio ambiente. Nós reescalamos  $\omega$  de forma que  $\omega = \omega' B^z$  e a escala de tempo é definida como sendo  $(B^z)^{-1}$ . Em todos os resultados nós usamos uma frequência de corte  $\omega_c = 50B^z$ . Nosso principal objetivo é ilustrar a dinâmica da porta lógica quântica XOR geral para dois tipos de acoplamento com o banho térmico que produzirão decoerência ou dissipação. Com esta finalidade nós determinamos a população dos quatro estados da base computacional como função do tempo, ou seja,

$$P_{ij}(t) = \langle ij | \rho(t) | ij \rangle, \quad \text{com } i, j = 0, 1, \quad (5.57)$$

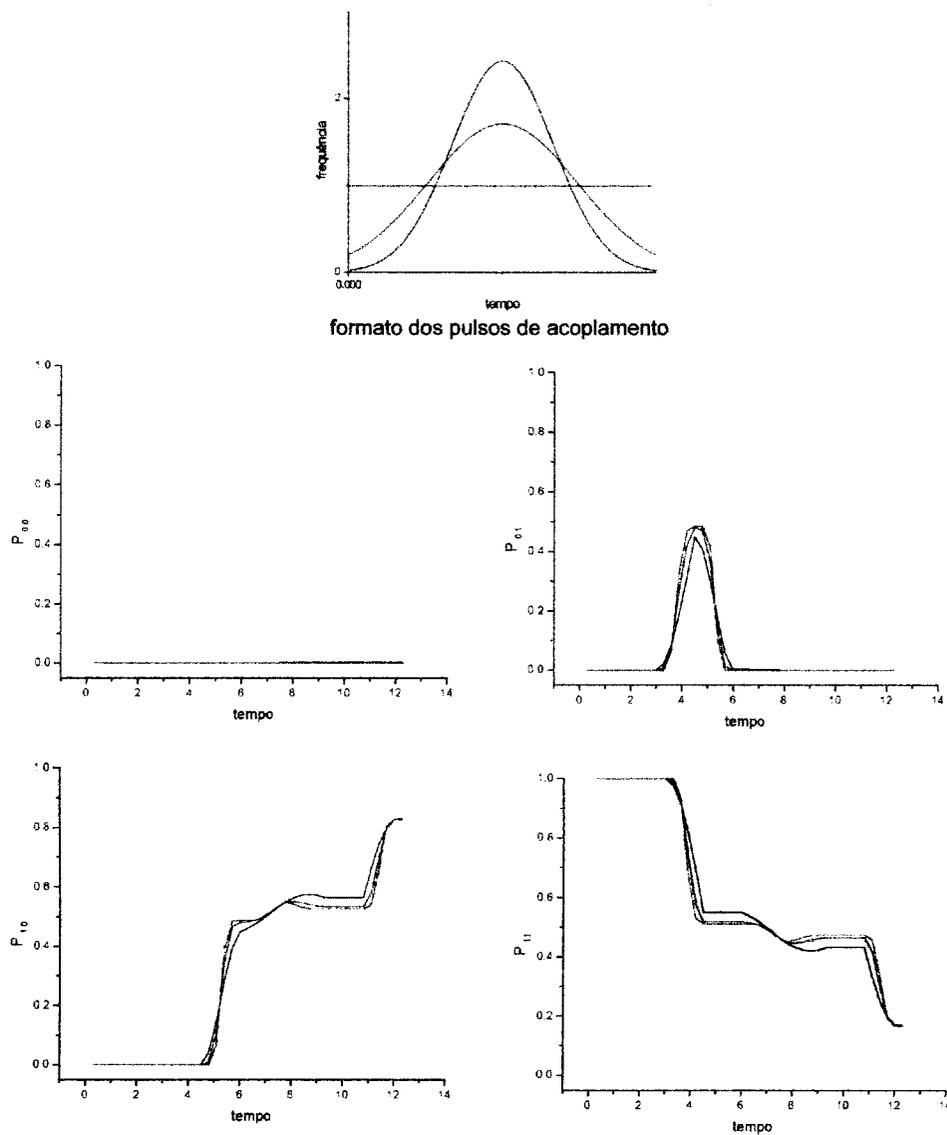
para a condição inicial

$$\rho(0) = |11\rangle \langle 11|. \quad (5.58)$$

Observando as perturbações para três tipos distintos de pulsos (dois gaussianos e um quadrado) tentamos determinar qual a distribuição de energia, cedida pelo pulso, seria menos susceptível ao meio ambiente.

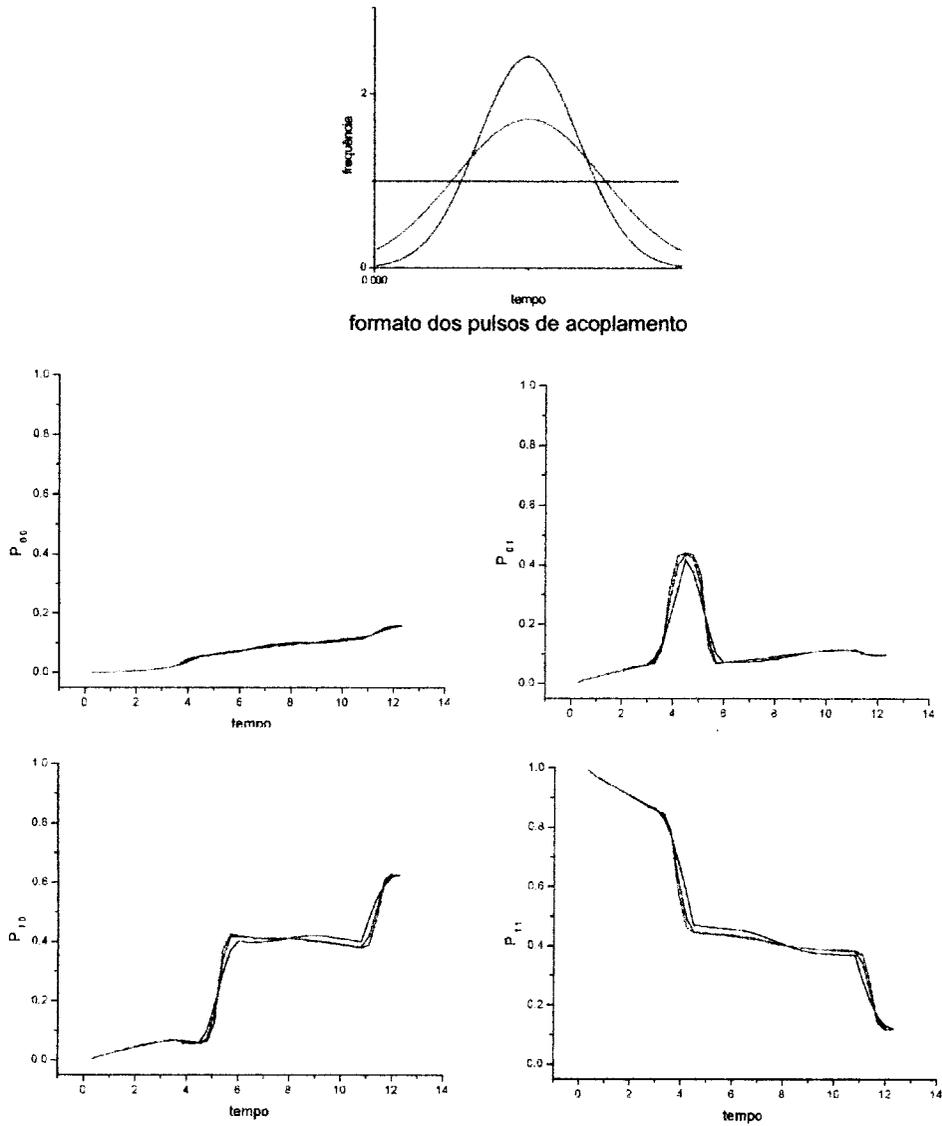
Os gráficos nas próximas páginas mostram as populações em função do tempo para três tipos distintos de pulsos e acoplamento com  $\sigma^z$  computando efeitos de decoerência e  $\sigma^x$  computando efeitos de dissipação.

**POPULAÇÕES DURANTE A OPERAÇÃO DA PORTA LÓGICA QUÂNTICA XOR INCLUINDO DECOERÊNCIA**



**Figura 5.2:** Dinâmica da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos na sua componente  $\sigma^z$  para o caso de iguais energias de acoplamento e três diferentes formatos de pulsos. O tempo está na escala de  $1/B^z$ , a constante de acoplamento  $\gamma^z = 0.01$  e a temperatura  $T = 0.01\hbar B^z/K_B$ . A condição inicial é  $\rho(0) = |11\rangle\langle 11|$ .

**POPULAÇÕES DURANTE A OPERAÇÃO DA PORTA LÓGICA QUÂNTICA XOR INCLUINDO DISSIPAÇÃO**



**Figura 5.3:** Dinâmica da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos na sua componente  $\sigma^x$  para o caso de iguais energias de acoplamento e três diferentes formatos de pulsos. O tempo está na escala de  $1/B^2$ , a constante de acoplamento  $\gamma^x = 0.01$  e a temperatura  $T = 0.01\hbar B^2/K_B$ . A condição inicial é  $\rho(0) = |11\rangle\langle 11|$ .

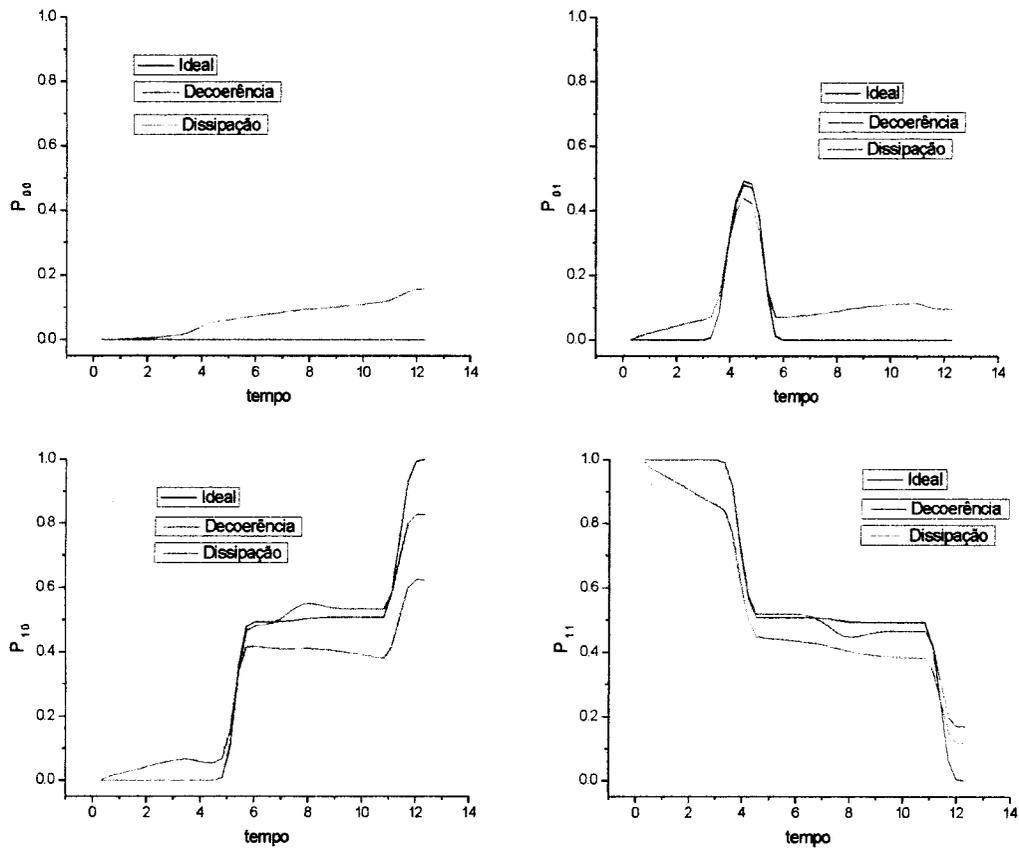
O que os gráficos nos mostram é que, seja qual for a forma do pulso usado, os efeitos, tanto da decoerência como da dissipação, não são diferentes no final do processo, ou seja, não importa como distribuamos esta energia para o qubit as populações no final do processo serão idênticas. Logicamente que no decorrer do processo as populações são diferentes para cada tipo de pulso, pois a energia distribuída por estes é diferente durante o processo mas igual no tempo  $t = t_{XOR}$ , sendo  $t_{XOR}$  o tempo de duração da porta lógica.

É importante ressaltar que o método numérico QUAPI possui dois parâmetros que devem ser propriamente ajustados: o tamanho do passo  $\Delta t$  e a quantidade de memória  $\Delta K$ , que indica o tempo total da memória ( $K\Delta t$ ) do sistema quântico. Para um passo pequeno, o erro devido à fatoração do Hamiltoniano, Eq. (5.21), diminui proporcionalmente com  $\Delta t^3$ , e nessas circunstâncias se faz necessário que a quantidade de memória  $K$  seja suficientemente grande para que possamos incluir todos os efeitos perturbativos relevantes ao processo. Sendo assim, visto que o incremento da variável  $K$  implica um grande esforço computacional, se faz necessário ponderar o erro devido à quantidade de memória, e o erro devido à fatoração do Hamiltoniano que depende do tamanho do passo.

De acordo com o *princípio da sensibilidade mínima* [14], o que se faz é procurar um certo passo  $\Delta t$  no qual a mudança da variável  $K$  interfira minimamente nas quantidades medidas. No caso, verificamos que a melhor relação memória/passo foi dada por  $K=2$  e  $\Delta t = 0.15(B^z)^{-1}$ .

A diferença na dinâmica na presença da decoerência e da dissipação do caso ideal é claramente visível quando comparamos as populações no decorrer do processo, conforme a próxima figura.

**COMPARAÇÃO DAS POPULAÇÕES DURANTE A OPERAÇÃO DA PORTA LÓGICA QUÂNTICA XOR.**



**Figura 5.4:** Dinâmica da porta lógica quântica XOR acoplada a um banho de osciladores harmônicos para o caso de iguais energias de acoplamento para o caso (i) Ideal (sem perturbação); (ii) Decoerência; (iii) Dissipação. O tempo está na escala de  $1/B^z$  e a temperatura  $T = 0.01\hbar B^z/K_B$ . A condição inicial é  $\rho(0) = |11\rangle\langle 11|$ .

---

## Conclusão

---

Nessa dissertação nós fizemos diversos estudos sobre a decoerência e a dissipação quântica para um sistema de dois qubits que interagem com campos externos e entre si controladamente. Para tal, acoplamos o Hamiltoniano dos qubits a um banho de osciladores harmônicos a fim representarmos as perturbações do ambiente.

Inicialmente, no **Capítulo 3**, analisamos as perturbações provenientes da decoerência no regime em que a escala de tempo é muito menor que o tempo característico do sistema, de forma que pudemos ignorar o Hamiltoniano do sistema, e verificamos que a dinâmica do operador densidade para o caso de  $n$  qubits é proporcional, numa primeira aproximação, ao quadrado do tempo. Observamos também, que neste regime a dinâmica do operador densidade independe da forma do banho térmico, de forma que seja qual for o modelo para os infinitos grau de liberdade do ambiente, o resultado é o mesmo, universal. Neste regime, o operador evolução temporal pode ser escrito como  $U(t) \approx e^{-\alpha t^2}$  onde  $\alpha$  é um operador que independe da forma do banho térmico.

No **Capítulo 4** mostramos, para o caso sem perturbação, que através de uma sequência bem definida de pulsos magnéticos, é possível manipular os qubits de forma que estes, independente de suas populações iniciais, obedeçam sempre a tabela verdade da porta lógica quântica XOR. Implementamos o método numérico conhecido como *Integrador Unitário* com a finalidade de resolver a dinâmica do sistema para o caso em que o Hamiltoniano depende do tempo. Tal método, nos

possibilitou calcular a dinâmica do sistema, para o exemplo da porta lógica quântica XOR, de uma forma muito mais realista, pois nos permitiu simular pulsos de campos magnéticos gaussianos e não só quadrados, como geralmente é feito na literatura. Desta forma, pudemos analisar a decoerência e a dissipação em mais este aspecto. Com o *Integrador Unitário*, quando consideramos o acoplamento com o banho de osciladores harmônicos, pudemos procurar um pulso ideal, que fosse menos sensível às perturbações externas.

Finalmente, no **Capítulo 5**, através do método numérico *Propagador Quase-Adiabático (QUAPI)* de Makri e Makarov, nós investigamos a decoerência e a dissipação da informação quântica no processo que envolve um Hamiltoniano dependente do tempo acoplado a um reservatório externo por meio de um banho de osciladores harmônicos. Nós aplicamos este método iterativo para o nosso exemplo da porta lógica quântica XOR onde a dinâmica do Hamiltoniano do sistema foi calculada através do *Integrador Unitário*, e as perturbações provenientes do meio foram inseridas através do *funcional de influência*. Variamos as formas dos pulsos a fim de procurarmos um pulso ideal que fosse menos susceptível às perturbações externas, mas observamos que todos os três tipos de pulsos usados, ao final da operação, apresentavam a mesma população, o que nos levou a concluir que a maneira que uma dada energia é distribuída ao sistema, num certo intervalo de tempo, não altera de forma significativa as populações finais dos qubits. Vale ressaltar que aproximações Markovianas não foram usadas neste trabalho.

# A

---

## Porta Hadamard

---

Apresentamos neste apêndice a operação lógica quântica desenvolvida pela porta de Hadamard. Esta operação, juntamente com a porta lógica quântica definida como  $T$  e a porta lógica XOR, descrita neste trabalho, formam um conjunto de operações lógicas universal de forma que toda e qualquer operação lógica pode ser desenvolvida utilizando somente estas portas.

A porta lógica  $T$ , citada acima, é uma operação de um qubit e é definida conforme a matriz abaixo:

$$T \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\frac{\pi}{4}) \end{bmatrix},$$

d forma que opera conforme a tabela verdade abaixo

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle; \quad |1\rangle \rightarrow e^{i\frac{\pi}{4}} |1\rangle.$$

A porta lógica de Hadamard, que será apresentada neste apêndice, também é uma porta lógica de um qubit, e tem como função principal retornar uma combinação linear dos estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . A porta lógica de Hadamard é definida como

$$Had \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix},$$

e a tabela verdade é dada por

$$\begin{aligned} \text{Had} |0\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \\ \text{Had} |1\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned}$$

Apresentamos neste apêndice a operação da mesma somente no *primeiro qubit*, de forma que num sistema de dois qubits, a operação *Had* aplicada no primeiro qubit possui a seguinte tabela verdade

$$\begin{aligned} \text{Had} |00\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle), \\ \text{Had} |01\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle), \\ \text{Had} |10\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |10\rangle), \\ \text{Had} |11\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |11\rangle). \end{aligned}$$

O operador densidade inicial utilizado é assumido  $|11\rangle\langle 11|$  e a transformação do mesmo é então, assim, após a aplicação da porta Hadamard, dada conforme ilustramos abaixo

$$\text{Had} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & -0.5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5 & 0 & 0.5 \end{bmatrix},$$

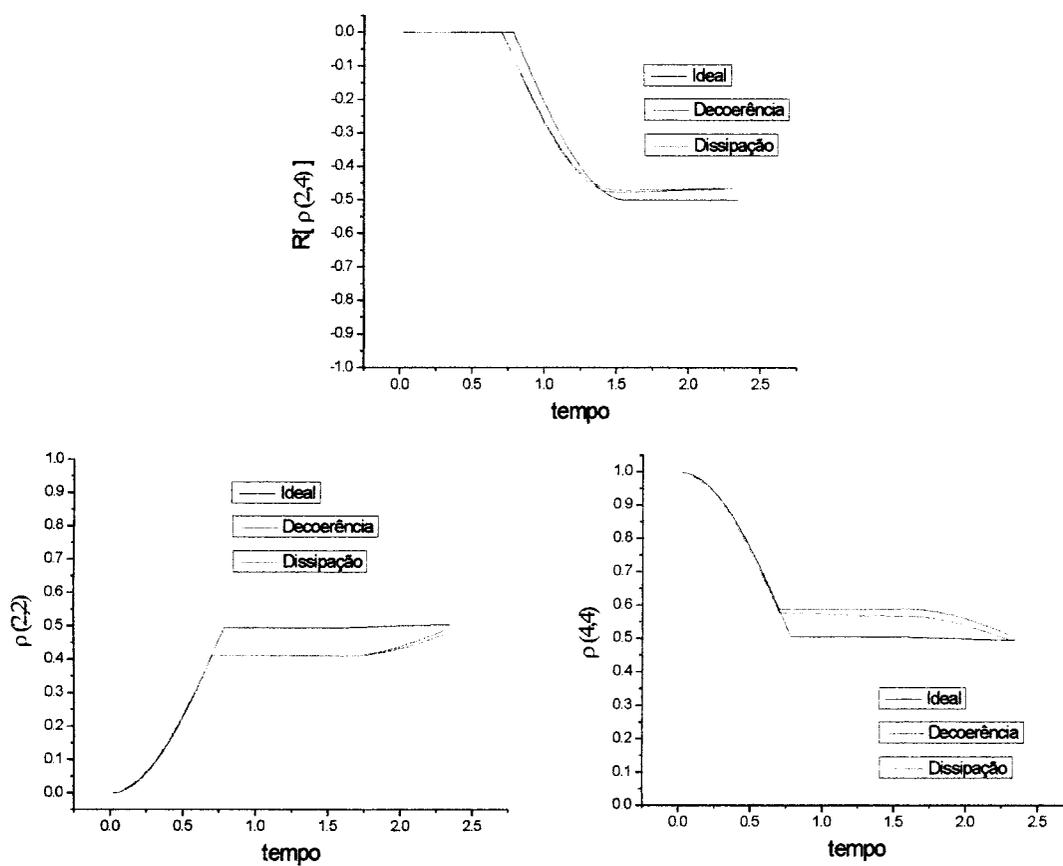
de forma que analisamos a decoerência e a dissipação quântica observando os elementos de matriz [2,2], [4,4], e a parte real do elemento [2,4] do operador densidade. A operação lógica pode ser executada por uma sequência de pulsos dada por

$$\text{Had} = U^x \left( \frac{\pi}{4} \right) U^z \left( \frac{\pi}{4} \right) U^x \left( \frac{\pi}{4} \right)$$

onde

$$U^{x/z} = \exp \left( \frac{iB^{x/z} \sigma^{x/z} \Delta t}{2\hbar} \right).$$

**COMPARAÇÃO DAS POPULAÇÕES  
DURANTE A OPERAÇÃO DA PORTA  
LÓGICA HADAMARD.**



**Figura A.1:** Dinâmica da porta lógica quântica *Had* acoplada a um banho de osciladores harmônicos para o caso de iguais energias de acoplamento para o caso (i) Ideal (sem perturbação); (ii) Decoerência; (iii) Dissipação. O tempo está na escala de  $1/B^2$  e a temperatura  $T = 0.01\hbar B^2/K_B$ . A condição inicial é  $\rho(0) = |11\rangle\langle 11|$ .

---

# Bibliografia

---

- [1] Feynman, R., *International Journal of Theoretical Physics*, **21**, 467 (1982).
- [2] Deutsch, D., *Proceedings of the Royal Society of London*, **A400**, 97 (1985).
- [3] Deutsch, D., *Proceedings of the Royal Society of London*, **A425**, 73 (1989).
- [4] Shor, Peter W., *Proceedings of 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (1994).
- [5] W. H. Zurek, *Phys. Today* **44**, 36 (1991).
- [6] M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw, and A. Zeilinger, *Nature* (London) **401**, 680 (1999).
- [7] D. Braun, F. Haake e W. T. Strunz, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2913 (2001).
- [8] Y. Makhlin, G. Schön, and A. Shnirman, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 357 (2001).
- [9] B. A. Shadwick and W. F. Buell, *J. Phys. A* **34**, 4771 (2001).
- [10] B. A. Shadwick and W. F. Buell, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5189 (1997).
- [11] N. Makri, *Chem. Phys. Lett.* **193**, 435 (1991).
- [12] R. P. Feynman and F. L. Vernon, *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963).
- [13] D. E. Makarov and N. Makri, *Chem. Phys. Lett.* **221**, 482 (1994); N. Makri and D. E. Makarov, *J. Chem. Phys.* **102**, 4600 (1995); **102**, 4611 (1995); N. Makri, *J. Math. Phys.* **36**, 2430 (1995).

- [14] M. Thorwart, P. Reimann, and P. Hänggi, Phys. Rev. E **62**, 5808 (2000).