

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional
Curso de Mestrado em Modelagem Computacional

COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM SISTEMAS ABERTOS E UMA
APLICAÇÃO AO MODELO BIOLÓGICO DE FRÖHLICH

Por

Jean Faber Ferreira de Abreu

sob orientação do

Prof. Dr. Renato Portugal, D.Sc.

e sob co-orientação do

Prof. Dr. Luiz Pinguelli Rosa, D.Sc.

Maio de 2004

Petrópolis, RJ - Brasil

COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM SISTEMAS ABERTOS E UMA
APLICAÇÃO AO MODELO BIOLÓGICO DE FRÖHLICH

Jean Faber Ferreira de Abreu

DISSERTAÇÃO APRESENTADA AO CORPO DOCENTE DA
COORDENAÇÃO DE FORMAÇÃO DE RECURSOS HUMANOS DO
LABORATÓRIO NACIONAL DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE MESTRE EM MODELAGEM COMPUTACIONAL.

Aprovada por:

Renato Portugal, D.Sc.
Orientador

Luiz Pinguelli Rosa, D.Sc.
Co-orientador

Augusto C. N. Rodrigues Galeão, D.Sc.
Primeiro Examinador

Laurent Dardenne, Ph.D.
Segundo Examinador

Ivan dos Santos Oliveira Júnior, Ph.D.
Terceiro Examinador

Petrópolis, RJ - Brasil

Maio de 2004

FABER, JEAN FERREIRA DE ABREU

Computação Quântica em Sistemas
Abertos e uma Aplicação ao Modelo
Biológico de Fröhlich [Petrópolis] 2004

VIII, 73, 27,5cm (MCT/LNCC, M.
Sc., Modelagem Computacional, 2004)

Tese - Laboratório Nacional de
Computação Científica, LNCC.

1. Computação Quântica

I. MCT/LNCC II. Título (Série)

Índice

Tabela de Conteúdo	v
Lista de Figuras	vi
1 Introdução	1
2 Informação e Computação Quântica	6
2.1 Representação Quântica de Informação	8
2.2 Evolução de Qubits:	10
2.3 Operações sobre Qubits:	11
2.4 Portas Lógicas Quânticas Universais	14
3 Operações Quânticas	15
3.1 Axiomatização das Operações Quânticas	16
3.2 Operações Quânticas e Sistemas Abertos	18
3.3 Superoperadores e a Representação Operador-Soma	18
3.4 Operações Quânticas e Medições	20
3.5 Interpretação Física para Operador-Soma	23
3.6 Canais Quânticos	24
3.6.1 Visualização Geométrica de Operações Quânticas	25
3.6.2 Canal Quântico Troca-de-Bit	26
3.6.3 Canal Quântico Troca-de-Fase	28
3.6.4 Canal Quântico de Amortecimento-de-Amplitude (<i>Quantum Amplitude-Damping Channel</i>)	30
3.6.5 Canal Quântico de Amortecimento-de-Fase (<i>Quantum Phase-Damping Channel</i>)	31
4 Aplicação em Sistemas Biológicos	35
4.1 O Hamiltoniano de Fröhlich	38
4.2 Modelo de Fröhlich como uma OQ	42

4.2.1	Considerações e Métodos	43
4.2.2	Canal de Amortecimento-de-Amplitude no Modelo de Fröhlich	45
4.2.3	Canal de Amortecimento-de-Fase no Modelo de Fröhlich	49
5	Conclusões	53
A	Sistemas Abertos	56
B	Oscilador Harmônico Quântico	60
C	Representação na Esfera de Bloch	64
D	Cálculo de $g(m,j)$	66
	Referências Bibliográficas	69

Lista de Figuras

2.1	Exemplos de portas lógicas	12
2.2	Circuito Quântico	13
2.3	Representação da operação controlada CNOT	14
3.1	Circuito representando uma Operação Quântica	18
3.2	Esquematização da medida implícita	24
3.3	Circuito amortecimento-de-fase, com $R_Y(\alpha) = \exp(-i\alpha Y/2)$	34
4.1	Esquema das características termodinâmicas do modelo de Fröhlich	39
A.1	Esquematização de um sistema aberto com fonte de calor e banho térmico	57
B.1	2,3—dibromotiofenil: exemplo de um oscilador harmônico	63
C.1	Esfera de Bloch	65

Resumo da Tese apresentada ao MCT/LNCC como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM SISTEMAS ABERTOS E UMA APLICAÇÃO AO
MODELO BIOLÓGICO DE FRÖHLICH

Jean Faber Ferreira de Abreu

19 de janeiro de 2006

Orientador: Renato Portugal, D.Sc.

Luiz Pinguelli Rosa, D.Sc.

Programa: Modelagem Computacional

Um Computador Quântico Universal é capaz de efetuar qualquer cálculo que qualquer Máquina de Turing clássica possa efetuar. Entretanto, a Mecânica Quântica ortodoxa é descrita a partir de sistemas isolados. Portanto, a descrição de Computadores Quânticos é feita a partir de transformações lineares e reversíveis. A interação do meio ambiente tende a eliminar efeitos quânticos como a superposição de estados. Contudo, nenhum sistema na natureza é de fato isolado. Assim, ruídos, dissipações e erros são “inevitáveis” para quaisquer procedimentos que manipulem informação com quaisquer recursos naturais. O formalismo conhecido por Operação Quântica (OQ) é usado para descrever sistemas quânticos abertos. A partir desse formato pode-se evidenciar operações e ruídos característicos de processos computacionais. Para mostrar a eficácia de OQ’s, aplicamos o formalismo no modelo quântico-biológico de Fröhlich. A partir dessa caracterização construímos uma ponte entre Computação Quântica e processos biológicos. Essa ponte pode revelar propriedades desconhecidas ou ajudar na compreensão da dinâmica microbiológica; ou mesmo em novas técnicas na construção de Computadores Quânticos.

Abstract of Thesis presented to MCT/LNCC as a partial fulfillment of the requirements
for the degree of Master of Science (M.Sc.)

QUANTUM COMPUTATION IN OPEN SYSTEMS AND AN APPLICATION IN THE
BIOLOGICAL MODEL OF FRÖHLICH

Jean Faber Ferreira de Abreu

19 de janeiro de 2006

Advisors: Renato Portugal, D.Sc.

Luiz Pinguelli Rosa, D.Sc.

Program: Modelagem Computacional

An Universal Quantum Computer is capable to perform any calculation that any classical Turing Machine can perform. However, the orthodox Quantum Mechanics is described for isolated systems. Therefore, the description of Quantum Computers is made starting from linear and reversible transformations. The interaction with the environment tends to eliminate the quantum effects as the superposition of states. However, any natural system is not in fact isolated. Hence, noises, dissipations and errors are “inevitable” for any procedures that manipulate information with any natural resources. The formalism known by Quantum Operation (QO) is used to describe most of the open quantum systems. Through this format we can display the characteristic noises of the computational processes. To show the effectiveness of the QO’s we applied the formalism in the quantum-biological model of Fröhlich. Starting from that characterization we build a bridge between Quantum Computation and biological processes. That bridge can reveal unknown properties or to help in understanding the microbiologic dynamics; or even new techniques in the construction of Quantum Computers.

Capítulo 1

Introdução

A definição formal de *computação* é atribuída a Alan Turing. Em 1936, num famoso artigo “On Computable Numbers, with an application to the Entscheidungsproblem”, Turing descreveu um procedimento abstrato que correspondia a um Sistema Formal automático [1,2]. Esse procedimento fornece um conjunto de definições, na forma de tabela de instruções, para estipular e manipular os estágios de uma máquina. Por isso esse procedimento é chamado de Máquina de Turing (MT). Uma Máquina de Turing Universal (MTU) é o procedimento que inclui o repertório de todas as Máquinas de Turing possíveis. A MTU estipula a classe de funções que poderiam ser computáveis, ou expressas na forma de um algoritmo. Essas funções são ditas funções Turing-computáveis ou funções algoritmizáveis [1,3,4].

A proposição do critério de processamento de informação, proposto por Turing, levou à construção de máquinas reais. Estas máquinas são objetos físicos que utilizam

recursos físicos para simular o comportamento lógico da MT. Assim, existe uma equivalência entre certos objetos físicos, que simulam as operações booleanas, e as portas lógicas abstratas em si [5]. Dessa equivalência surge uma proposição, inerente ao formalismo, de utilização de recursos clássicos da natureza.

Um processo computacional pode ser sumarizado como um conjunto de entradas, que corresponde aos estados iniciais da MT, que evoluem por passos finitos para estados intermediários até que um conjunto de saída específico seja encontrado. Se cada estado da máquina corresponde a um tipo de informação, então podemos dizer que a MT é um critério bem estabelecido para manipular informação. A disposição de cada entrada (e de cada saída) define uma informação com respeito a função que se está calculando [6,7].

Observando o comportamento de simulação de processos quânticos, Richard Feynman em 1982, foi o primeiro a conjecturar sobre a possibilidade de se utilizar recursos quânticos para efetuar computação [8]. Feynman verificou que a simulação de objetos quânticos era uma tarefa intratável¹ para computadores utilizando recursos clássicos. Ele conjecturou um simulador quântico que, através de um conjunto integrado de spins interagindo entre si, poderia reproduzir as propriedades mecânicas de qualquer ambiente a ser simulado [9,10].

Em 1985 David Deutsch provou a existência de um Computador Quântico Universal (CQU). Um CQU é capaz de efetuar qualquer cálculo que qualquer MT possa efetuar e de forma tratável [3]. David Deutsch reivindica ainda que processos computacionais, assim

¹Tarefas ou funções intratáveis são aquelas que o tempo de computação cresce pelo menos exponencialmente quando o tamanho da entrada cresce linearmente.

como computadores em si, são processos da natureza e que portanto uma manipulação universal de informação depende não apenas de critérios abstratos mas do que também a natureza permite ser manipulado [3,5].

Uma Computação Quântica (CQ) funciona exatamente nos moldes descritos por Turing. No entanto, a CQ utiliza efeitos quânticos para manipular a informação. A principal característica da CQ é o uso do efeito de interferência e de emaranhamento quântico [3,5,7,8,10].

A grande questão é que qualquer sistema quântico, incluindo computadores quânticos, em geral são descritos como sistemas isolados (Apêndice A) [7,8]. Efeitos quânticos, como superposição de estados, são “sensíveis” a interações com o ambiente. Estas, tendem a desaparecer conforme o tipo de acoplamento entre o sistema principal e o ambiente.

O efeito mais importante presente na interação de sistemas quânticos e o meio ambiente é a *descoerência*. Descoerência é um fenômeno de *emaranhamento* entre o ambiente e o sistema principal. Este emaranhamento gera uma interferência entre as fases relativas da função de onda do sistema principal e do ambiente. Devido ao elevado grau de liberdade que o ambiente possui, surge uma interferência aleatória entre os muitos estados do ambiente com o sistema principal [8,10-12]. Esse efeito se reflete diretamente na sustentação das superposições dos estados quânticos como será visto no tópico “Canal de Amortecimento-de-Fase” do Capítulo 3.

Qualquer processamento de informação, quântico ou clássico, terá maior dificuldade de realização se estiver num sistema aberto. Uma computação a sistema aberto insere

inevitavelmente erros e perda de informação. Em contrapartida, nenhum sistema na natureza é de fato isolado. Assim, ruídos, dissipações e erros são inevitáveis para qualquer procedimento que manipule informação com quaisquer recursos naturais. Desta forma, faz-se inteiramente necessário a descrição formal de um sistema computacional interagindo com o ambiente. Isso, para que se possa entender, evitar (ou controlar) os efeitos do meio sobre o processamento de informação que o sistema realiza [8,13].

A primeira parte dessa abordagem é quanto a definição e representação de informação utilizando-se recursos quânticos. Com essas definições, resumimos a Teoria Quântica da Computação introduzindo os conceitos e relações mais importantes [4,8,13,14]. A segunda parte é uma revisão detalhada do formalismo chamado Operações Quânticas (OQ's). Através desse formalismo é possível descrever a grande maioria dos sistemas quânticos interagentes com o ambiente num formato de tempo discreto. A partir desse formato pode-se evidenciar operações e ruídos característicos de processos computacionais. OQ's são uma ferramenta extramente importante pois, em sua abordagem, deixa explícito o sistema principal, revelando propriedades escondidas [8,13-17]. A terceira parte é quanto a possibilidade do tratamento de sistemas biológicos (que são sistemas abertos) sobre o ponto de vista, não apenas quântico, mas também computacional. Herbert Fröhlich desenvolveu um modelo teórico de sistemas biológicos enfocando algumas das propriedades físicas eléto-oscilatórias desses sistemas. O que ele conseguiu foi mostrar que, aproximando tais bio-sistemas por osciladores harmônicos acoplados com o ambiente, é possível haver efeitos quânticos nos mesmos [18,19].

A ponte com a computação é dada através da descrição das relações e interações físicas discretas e bem definidas. Além disso, essas interações físicas devem, ao final, fazer correspondência a algum tipo de processamento de informação (dadas as definições prévias dos tipos possíveis de representação de informação nesse contexto). Essa correspondência é totalmente possível através do formalismo de Operações Quânticas.

Capítulo 2

Informação e Computação Quântica

Para se falar de *computação* é conveniente introduzir alguns conceitos básicos sobre *informação*. A definição formal de informação clássica é atribuída a C. E. Shannon [20]. A definição de Shannon quantifica o quanto podemos obter de informação, em média, de uma variável aleatória X , quando aprendemos sobre o valor de X . Por essa razão essa definição é também chamada de Entropia de Shannon, pois mede a incerteza que X carrega [8,13]:

$$\langle I(X) \rangle \equiv \langle I(p(x_1) \dots p(x_n)) \rangle \equiv - \sum_i p(x_i) \log p(x_i), \quad (2.1)$$

tal que $p(x_k)$ representa a probabilidade da variável X assumir o valor x_k e onde o logaritmo é tomado na base dois. Essa definição de informação aparentemente não mostra uma correspondência direta com o mundo físico. No entanto, quaisquer eventos que ocorram na natureza são mediados por interações físicas e por objetos físicos. Cada parte da natureza carrega informação, e inversamente, para cada tipo de informação deve existir algum objeto

físico para representá-la. Essa afirmativa pode ser verificada a partir da relação [12,21,22]:

$$S_f = k \ln \Omega = -kN \left(\sum_i P_i \ln P_i \right) = -kN \ln(2) S_s \quad (2.2)$$

onde S_f é a entropia física de Boltzman (Apêndice A), $S_s \equiv \langle I \rangle$ é a entropia de Shannon, k é a constante de Boltzman, Ω é a medida da probabilidade de ocorrer um certo estado termodinâmico, N a quantidade de entidades físicas do sistema e P_i é a probabilidade de ocorrer um certo estado termodinâmico definida por $P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} N_i/N$. O termo Ω é dado pela distribuição do número total de micro estados correspondentes a um dado macro estado.

Da relação (2.2) pode-se deduzir que o conceito de informação e a entropia física descrevem o mesmo processo na natureza [21]. Essa expressão, portanto, corrobora com o enunciado de que o mundo físico é informação e informação é, em certo sentido, física ¹

Portanto, temos uma maneira de tratar e relacionar informação com recursos físicos. A questão então é como representar e processar informação utilizando recursos quânticos. Os efeitos de superposição e correlação quântica podem proporcionar uma nova perspectiva no que se refere ao processamento de informação. Essa é a motivação chave da computação quântica.

Os primeiros grandes resultados foram proporcionados por algoritmos usando ferramentas unicamente quânticas. P. Shor demonstrou que um sistema físico utilizando recursos

¹Uma análise mais cautelosa sobre o conceito de informação pode revelar certos rumores mais fundamentais e filosóficos. Um primeiro ponto é que podemos assumir que o mundo existe objetivamente, mas uma informação só existe se houver algum sistema que assimile essa informação, processe-a e reaja a partir dela. O conceito de informação carrega inerentemente uma certa subjetividade ou a necessidade de uma semântica.

quânticos pode, em princípio, fatorar números de maneira tratável [6]. Um pouco depois L. Grover desenvolveu um algoritmo quântico de busca em banco de dados no qual reduz quadraticamente a busca quando comparado com o tempo de computação clássico [7,23].

2.1 Representação Quântica de Informação

Dentro da Teoria de Informação, a unidade de informação clássica é o *bit*, no qual é definido em dois valores $\{0, 1\}$. Na informação quântica a unidade de informação faz referência aos bits clássicos e aos estados quânticos associados, sendo chamados de “quantum bits” ou *qubits*².

Um qubit mora num espaço de Hilbert bidimensional [24]. A base ortonormal para os vetores deste espaço é dada por $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. O estado mais geral de um qubit pode ser, portanto escrito na forma³ [8,7,13,25,]

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \\ &= \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{2.3}$$

onde α e β são números complexos que satisfazem a relação de completudeza $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Essa expressão mostra a propriedade de conservação de probabilidade. Portanto, um qubit, no estado geral, possui probabilidade $|\alpha|^2$ de assumir o valor lógico “0” e $|\beta|^2$ de tomar o valor lógico “1” [8,11,13].

²É importante dizer que este é um formato inteiramente matemático. Fisicamente um qubit pode ser pensado como qualquer sistema quântico representando dois níveis. Nessa classe inclui-se spins, fótons, níveis de energia, etc.

³Aqui é usada a notação de Dirac para a representação dos vetores de estado e dos operadores quânticos [8,11,13].

Como obviamente valem as relações quânticas, qualquer medida sobre $|\psi\rangle$ destruirá a superposição, exceto para $\alpha = 0$ ou $\beta = 0$. Se o valor de um qubit é desconhecido, então não existe nenhum procedimento que revele os valores de α e β . Porém, se o qubit estiver num estado conhecido pode-se controlá-lo, por meio de transformações unitárias, sem destruir a superposição, de modo a levá-lo para um estado final desejado. Este é procedimento chave para se fazer computação quântica [11,13].

Uma segunda alternativa, extremamente útil, para a representação de informação quântica é a forma de *operador densidade* ou *matriz densidade*⁴. Operadores densidade são um formalismo totalmente equivalente ao descrito pelos estados quânticos. Um operador densidade ρ pode ser definido como um *ensemble* de estados quânticos $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, onde estado $|\psi_i\rangle$ ocorre com probabilidade p_i . Isto é, para $0 < p_i \leq 1$ e $\sum_i p_i = 1$, temos [8,11,13]

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (2.4)$$

A representação de um qubit dado por (2.3), na forma de operador densidade fica como

$$\rho = |\alpha|^2 |0\rangle \langle 0| + \alpha\beta^* |0\rangle \langle 1| + \alpha^*\beta |1\rangle \langle 0| + |\beta|^2 |1\rangle \langle 1|. \quad (2.5)$$

As propriedades de ρ são:

1. ρ é Hermitiano: $\rho = \rho^\dagger$
2. ρ é positivo: para qualquer estado $|\psi\rangle$, $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$.

⁴É advertido que será usado ambos os termos em situações diferenciadas sem prévio aviso.

3. ρ conserva a probabilidade: $tr(\rho) = 1$.

Dessas propriedades segue que ρ pode ser sempre diagonalizável e que seus autovalores são números reais não negativos, onde a soma destes é igual a um. Dizemos ainda que ρ está num *estado puro* se $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ e neste caso vale a propriedade $Tr[\rho^2] = 1$. Quando o estado não é puro é chamado de *estado misto* tal que $Tr[\rho^2] < 1$.

A extensão da representação para mais de um qubit é dada pelo quarto postulado da Mecânica Quântica [11]. Ou seja, para um conjunto de dois qubits na forma

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \\ |\varphi\rangle &= \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle, \end{aligned} \tag{2.6}$$

vale o produto tensorial:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle &= (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle) \\ &= \alpha\gamma|00\rangle + \alpha\delta|01\rangle + \beta\gamma|10\rangle + \beta\delta|11\rangle. \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde, este é um produto não comutativo, $|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle \neq |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$.

Um estado na forma $|00\rangle + |11\rangle$, não fatorável, é dito estar *emaranhado* ou *correlacionado*. Estados nesta forma são também conhecidos por estados de Bell em homenagem a John Bell [8,11-13].

2.2 Evolução de Qubits:

Do postulado sobre a evolução temporal de sistemas quânticos na Mecânica Quântica (MQ) temos que, para qualquer sistema quântico isolado, a evolução deste sistema é

descrita por uma transformação unitária. Um estado $|\psi\rangle$, que representa o sistema num instante $t_0(= 0)$ passará para um estado $|\psi'\rangle$, num instante t , pela aplicação de um operador unitário U , que depende somente de t_0 e t [8,11]:

$$|\psi'\rangle = |\psi(t)\rangle = U(t_0, t)|\psi(0)\rangle.$$

Ou, da equação de Schrödinger [8,11-13,21], inferimos que⁵

$$i\hbar\dot{|\psi(t)\rangle} = H|\psi(t)\rangle \quad \Leftrightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}H(t-t_0)\right)|\psi(0)\rangle. \quad (2.8)$$

Portanto,

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right). \quad (2.9)$$

Da mesma forma, pode-se verificar, da definição (2.4), que

$$\rho' = \rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0). \quad (2.10)$$

2.3 Operações sobre Qubits:

Dada a representação básica de informação utilizando recursos quânticos e a forma geral como essa informação evolui, pode-se introduzir operações lógicas básicas. A nível de didática, será apresentado operações sobre sistemas de um único qubit. Operações sobre qubits precisam preservar a norma, pela condição de conservação da probabilidade exigida

⁵O fato de não haver especificidade para quais tipos de transformações unitárias devam ser aplicadas, implica que qualquer transformação unitária é possível na prática.

pelo postulado da evolução de um sistema da MQ, e são descritas por matrizes unitárias.

As transformações mais importantes são aquelas dadas pelas matrizes de Pauli [8]:

$$X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Existem ainda outras três matrizes extremamente importantes em computação quântica. São elas H (Hadamard), S (matriz de fase) e T (matriz $\pi/8$) [8]:

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad S \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \quad T \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/4) \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Para melhor adequação à linguagem computacional essas matrizes também são chamadas de portas lógicas quânticas.

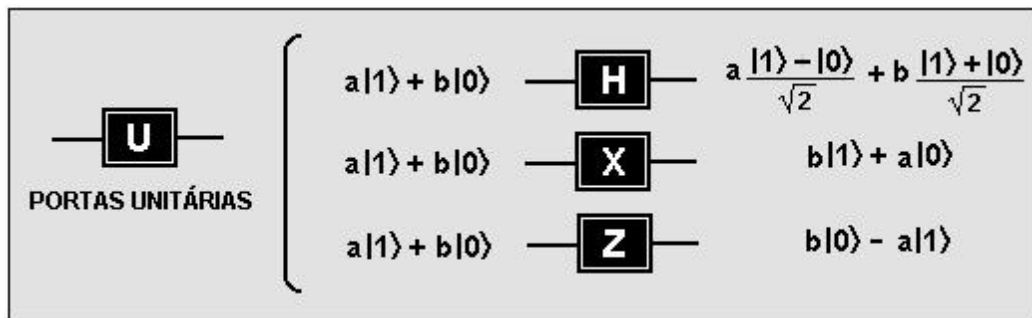


Figura 2.1: Exemplos de portas lógicas
(figura modificada de [8], pag. 19)

Essas expressões quânticas podem ser representadas tanto na forma matricial (ou de operadores) quanto na forma de circuito. A figura 2.1 fornece uma boa noção da esquematização de matrizes em portas lógicas. Essa notação é extremamente útil pois compacta, organiza e fornece uma visualização do processo computacional realizado. Para essa representação, basta associar a cada matriz uma porta lógica que será ligada por um “fio” [8].

Este fio é apenas uma abstração que, de fato, representa uma operação I (identidade) sobre o estado.

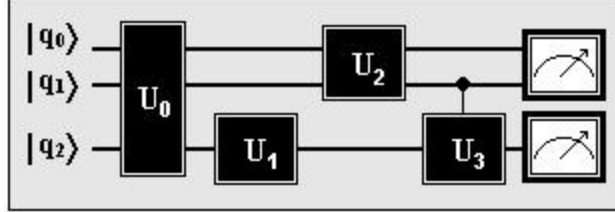


Figura 2.2: Circuito Quântico
(criação própria)

Na figura 2.2 vemos um esquema geral para representarmos as operações computacionais quânticas em forma de circuito. Os operadores U_i ($i = 0, 1, 2, 3$) são operadores unitários⁶ que atuam sobre os qubits $|q_j\rangle$ ($j = 0, 1, 2$). Nesse circuito da figura 2.2, U_0 atua nos três qubits de entrada (ou seja, sobre o estado $|q_0\rangle \otimes |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle$), U_2 atua apenas em $|q_0\rangle$ e $|q_1\rangle$, enquanto U_1 atua apenas em $|q_2\rangle$. Na porta lógica U_3 aparece uma dependência de sua atuação, ou seja, a aplicação de U_3 sobre o qubit $|q_2\rangle$ depende do valor do qubit $|q_1\rangle$. Esse tipo de porta lógica é conhecida por *operação controlada (controlled gate)* [8,13,25]. Operações controladas descrevem situações onde existem condicionais do tipo “Se A então B”. A porta controlada mais usada em computação quântica é o CNOT (*Controlled NOT*, figura 2.3) que atua sobre dois qubits. Sua representação é:

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

⁶Por exemplo as matrizes de Pauli ou H , T ou S .

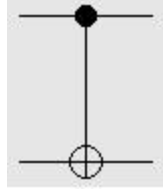


Figura 2.3: Representação da operação controlada CNOT
(figura retirada de [8], pag. 24)

O qubit associado à da linha de cima, no circuito da figura 2.3, é chamado de *qubit de controle* (*control qubit*) e o de baixo de *qubit alvo* (*target qubit*). A matriz correspondente à operação computacional CNOT realiza a seguinte tarefa:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; \quad |01\rangle \rightarrow |01\rangle; \quad |10\rangle \rightarrow |11\rangle; \quad |11\rangle \rightarrow |10\rangle. \quad (2.13)$$

Portas controladas são extremamente importantes pois, a partir dessas, é possível a demonstração da universalidade computacional quântica.

2.4 Portas Lógicas Quânticas Universais

Classicamente existe um conjunto de portas lógicas que são consideradas universais (AND, OR, NOT) [8,26]. Através dessas portas pode-se realizar qualquer procedimento computacional. Da mesma maneira, existem certas portas lógicas quânticas que tornam a computação quântica universal. É possível mostrar que qualquer operação unitária pode ser aproximada por um circuito contendo as portas de Hadamard (H), CNOT, $\pi/8$ (T) (e a matriz de fase (S)) [8,5,3]. Neste caso, uma porta quântica de dois qubits é suficiente para uma computação universal [4].

Capítulo 3

Operações Quânticas

Operações Quânticas (OQ's) são um formalismo matemático chave para a descrição da dinâmica de sistemas quânticos abertos. Esse formalismo descreve quase todos os sistemas quânticos, incluindo sistemas fechados, sistemas fracamente interagentes com o ambiente, fortemente interagentes e sistemas que estão sujeitos a mensuração [8,13-17,27,]. Outra característica interessante das operações quânticas é a possibilidade de escrevermos as transformações de estados sem a explicitação da passagem contínua do tempo. Apesar de ainda ser possível tal explicitação, em geral, usa-se outras ferramentas tais como *master equations*, *equações de Langevin* e *equações diferenciais estocásticas*[13,16].

Podemos definir uma OQ como um mapeamento que transforma um sistema quântico, definido por uma matriz (ou operador) densidade ρ , para um outro sistema na forma $\mathfrak{S}(\rho)$. O mapeamento mais simples é aquele que leva um estado ρ num outro estado ρ' ,

expresso por¹

$$\rho' = \mathfrak{S}(\rho). \quad (3.1)$$

As OQ's capturam as mudanças dinâmicas num estado devido a algum processo físico [13].

3.1 Axiomatização das Operações Quânticas

Formalmente, uma Operação Quântica pode ser expressa em três básicos axiomas. Estes, resumizam as relações entre os sistemas quânticos:

Axioma 1: O mapeamento $\mathfrak{S}(\cdot)$, que leva um conjunto de operadores densidade de um espaço de entrada A_1 para um conjunto de operadores densidade de um espaço de saída A_2 , é dito *completamente positivo* se [8]:

$$\forall P_A \in A, \text{ tal que } \forall |\varphi\rangle, \langle \varphi | P_A | \varphi \rangle \geq 0, \text{ então } \langle \varphi | \mathfrak{S}(P_A) | \varphi \rangle \geq 0.$$

onde, por simplicidade, assumimos $A = A_1 = A_2$ na referência do operador P_A . E ainda, para qualquer extensão B , gerando o espaço conjunto $A \otimes B$, o mapa $\mathfrak{S}(\cdot)$ satisfizer:

$$\forall P_B \in B, \text{ onde } \delta(P_B) = P_B \text{ tivermos } \langle \varphi | (\mathfrak{S} \otimes \delta)(P_A \otimes P_B) | \varphi \rangle \geq 0, \forall |\varphi\rangle.$$

A completa positividade diz que se P_A evolui e P_B não, então $P_A \otimes P_B$ evolui [13].

¹Este novo sistema, $\mathfrak{S}(\cdot)$, não necessariamente é uma matriz densidade, como será visto adiante.

Axioma 2: O mapa $\mathfrak{S}(\cdot)$ é *linear-convexo* sobre o conjunto de operadores densidades [13,15]:

$$\mathfrak{S}(\sum_i p_i \rho_i) = \sum_i p_i \mathfrak{S}(\rho_i). \quad (3.2)$$

$$\forall 1 \geq p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1$$

Axioma 3: O traço $Tr[\mathfrak{S}(\rho)]$ é a probabilidade do processo $\mathfrak{S}(\cdot)$ ocorrer, quando ρ for o estado inicial. Sendo $0 \leq Tr[\mathfrak{S}(\rho)] \leq 1$ para qualquer estado ρ [8].

Dada a axiomatização das Operações Quânticas, podemos introduzir vínculos com propriedades físicas de sistemas conjuntos. Podemos assumir um estado inicial de um sistema conjunto AB começando por um produto tensorial² na forma $\rho_A \otimes \rho_B$, onde ρ_A é o operador densidade associado ao sistema principal A e ρ_B o operador densidade associado ao sistema secundário B . O sistema conjunto AB evolui, num tempo finito, por uma transformação unitária dada por U_{AB} [8,27]:

$$U_{AB}(\rho_A \otimes \rho_B)U_{AB}^\dagger. \quad (3.3)$$

É importante frizar que a transformação U_{AB} atua no sistema conjunto AB simultaneamente. Portanto, para considerar somente o sistema A , precisamos tomar o traço parcial sobre o sistema B como

$$\rho'_A = Tr_B[U_{AB}(\rho_A \otimes \rho_B)U_{AB}^\dagger]. \quad (3.4)$$

Desta forma, a equação (3.4) representa um mapeamento $\mathfrak{S} : \rho_A \rightarrow \rho'_A$, onde $\mathfrak{S}(\rho_A) = \rho'_A$ é uma matriz densidade. Na figura 3.1 vemos uma representação geral do

²Pode-se mostrar que o formalismo de OQ é totalmente válido para sistemas que não estejam inicialmente num produto tensorial — sistemas emaranhados

mapeamento realizado por uma OQ.



Figura 3.1: Circuito representando uma Operação Quântica
(figura modificada de [8], pag. 362)

3.2 Operações Quânticas e Sistemas Abertos

Para estudarmos o caso de um sistema quântico aberto, basta particularizarmos o sistema B (apresentado no tópico anterior), fazendo com que este represente o estado do ambiente:

$$\mathfrak{S}(\rho) = Tr_E[U(\rho \otimes \rho_E)U^\dagger], \quad (3.5)$$

onde ρ_E representa o estado correspondente ao ambiente, ρ representa o sistema principal e U a transformação unitária que atua no sistema conjunto $\rho \otimes \rho_E$.

3.3 Superoperadores e a Representação Operador-Soma

Existe uma segunda forma de representação de OQ's que explicita o sistema principal e as operações sobre ele. Para descrevermos esta representação vamos tomar o ambiente num estado puro na forma $\rho_E = |e_0\rangle\langle e_0|$ onde sua base ortonormal é dada por $\{|e_k\rangle\}$, tomada num espaço de dimensão finita. Denotando ainda o estado principal por ρ e a

transformação unitária conjunta por U , resgatamos a equação (3.3). Tomando o traço no ambiente teremos

$$\mathfrak{S}(\rho) = \sum_i \langle e_k | U(\rho \otimes |e_0\rangle\langle e_0|) U^\dagger | e_k \rangle = \sum_k S_k \rho S_k^\dagger, \quad (3.6)$$

onde $S_k \equiv \langle e_k | U_{AE} | e_0 \rangle$ é um operador que atua somente sobre o espaço de estados do sistema principal. A equação (3.6) expressa a representação conhecida por *Operador-Soma* (*Operator-Sum Representation*). Os operadores S_k são chamados de *elementos de operação* ou *superoperadores* ³[8,13,15,27].

Uma importante relação sobre OQ's surge quando tomamos o traço sobre um mapeamento $\mathfrak{S}(\rho)$:

$$Tr[\mathfrak{S}(\rho)] = Tr[(\sum_k S_k S_k^\dagger) \rho] \leq 1. \quad (3.7)$$

Da condição do traço de um operador densidade, implica que a equação (3.7) será igual a unidade se e somente se

$$\sum_k S_k S_k^\dagger = I. \quad (3.8)$$

Essa condição expressa a *relação de completeza* que determina quando um mapeamento é dito *traço-preservado* (*trace-preserving*), isto é, quando o mapeamento leva um estado quântico noutro estado quântico. O caso onde $Tr[\mathfrak{S}(\rho)] < 1$ portanto ocorrerá quando tivermos $\sum_k S_k S_k^\dagger < I$, essa é a condição para um mapeamento *traço-não-prevervado* (*non-trace-preserving*) [8]. Do axioma 3, podemos inferir que essa situação representa uma falta de informação sobre o sistema.

³As vezes é referido também como representação de Kraus, e operadores de Kraus [13].

A representação *Operador-Soma* é interessante pois atribui toda a importância da descrição da dinâmica do sistema conjunto ao estado principal. Tudo o que se precisa é conhecer as propriedades dos operadores S_k que atuam sobre o sistema principal. Quaisquer informações irrelevantes, contidas no sistema secundário podem ser descartadas.

3.4 Operações Quânticas e Medições

Nessa seção será feita uma generalização sobre a aplicação de OQ's na dinâmica de sistemas acoplados ao ambiente. Essa generalização diz respeito ao processo de medida após o sistema conjunto ter evoluído por uma interação unitária.

Para descrevermos esse processo sob a ótica de Operações Quânticas, tomemos novamente conjunto dado por

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_E, \quad (3.9)$$

onde A denota o sistema principal e E o ambiente. O sistema conjunto evolui por uma transformação unitária U . Após a interação unitária, o estado (3.9) estará na forma [8,11-13]

$$\rho' = U(\rho_A \otimes \rho_E)U^\dagger. \quad (3.10)$$

Assumindo um conjunto de projetores $\{P_m\}$ e aplicando o postulado da medida [8,11-13] em (3.10) teremos:

$$\rho'_m = \frac{P_m \rho' P_m^\dagger}{\text{Tr}[P_m \rho' P_m^\dagger]} = \frac{P_m U(\rho_A \otimes \rho_E)U^\dagger P_m^\dagger}{\text{Tr}[P_m U(\rho_A \otimes \rho_E)U^\dagger P_m^\dagger]}, \quad (3.11)$$

que fornece o estado final do sistema AE quando a medida m é realizada. Para isolarmos

o estado principal tomamos o traço sobre o ambiente:

$$Tr_E[\rho'_m] = \frac{Tr_E[P_m U(\rho_A \otimes \rho_E) U^\dagger P_m^\dagger]}{Tr[P_m U(\rho_A \otimes \rho_E) U^\dagger P_m^\dagger]}. \quad (3.12)$$

Dos axiomas apresentados anteriormente, a definição de uma OQ pode ser então estendida como

$$\mathfrak{S}_m(\rho) = Tr_E[P_m U(\rho \otimes \rho_E) U^\dagger P_m^\dagger]. \quad (3.13)$$

É importante notar que o estado final de ρ'_m , após a medida, é dado pela equação (3.11) ou equivalentemente por $\mathfrak{S}_m(\rho)/Tr[\mathfrak{S}_m(\rho)]$. Ou seja, a probabilidade da medida m ocorrer é dada por $Tr[\mathfrak{S}_m(\rho)]$, satisfazendo o axioma 3.

Comparando (3.12) com (3.13) vemos que a extensão impõe uma perda de informação sobre o sistema principal medido. Essa perda de informação é atribuída à não normalização do estado final. Isto é, a generalidade da extensão (3.13) pode ser vista na desigualdade

$$\mathfrak{S}_m(\rho) \leq Tr_E[\rho'_m]. \quad (3.14)$$

Onde a igualdade será válida apenas para o caso particular de $P_m \equiv I$. Com essa particularização resgata-se toda a descrição anterior [8].

Para uma descrição no formato de *Operador-Soma*, tomemos uma decomposição espectral do estado do ambiente $\rho_E = \sum_i q_i |i\rangle\langle i|$ com sua base ortonormal dada por $\{|e_j\rangle\}$. Dessa maneira, ganha-se uma completa extensão do formato de OQ's. O mapeamento então fica [27]

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_m(\rho) &= \sum_{ij} q_i \langle e_j | P_m U(\rho \otimes |i\rangle\langle i|) U^\dagger P_m^\dagger | e_j \rangle \\ &= \sum_{ij} S_{ij} \rho S_{ij}^\dagger, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde os superoperadores tomam uma forma ainda mais geral:

$$S_{ij} \equiv \sqrt{q_i} \langle e_j | P_m U | i \rangle. \quad (3.16)$$

É importante colocar que nem (3.13), nem (3.15) são do tipo *traço-preservedo*[8].

3.5 Interpretação Física para Operador-Soma

Uma forma interessante de interpretarmos Operações Quânticas é imaginar que existe um processo de medida sobre o sistema. Considerando o postulado da medida (MQ) [11,12], dado um sistema num estado ρ , o estado correspondente logo após uma medida m ter sido realizada, será

$$\rho_m = \frac{S_m \rho S_m^\dagger}{Tr[S_m \rho S_m^\dagger]}, \quad (3.17)$$

aqui os superoperadores $\{S_m\}$ fazem o papel dos operadores de medida [2,3]. Para escrevermos os superoperadores S_m em função de transformações unitárias e das bases do ambiente, é interessante pensarmos numa medida projetiva $P_m = |e_m\rangle\langle e_m|$ atuando somente sobre o ambiente. Assim, considerando o caso onde o estado inicial do ambiente é $\rho_E = |e_0\rangle\langle e_0|$, cuja base é dada por $\{|e_j\rangle\}$, então escrevemos

$$\begin{aligned} S_m \rho S_m^\dagger &= \langle e_m | U(\rho \otimes |e_0\rangle\langle e_0|) U^\dagger | e_m \rangle \\ &= \sum_j \langle e_j | (|e_m\rangle\langle e_m| U(\rho \otimes |e_0\rangle\langle e_0|) U^\dagger | e_m\rangle\langle e_m|) | e_j \rangle \\ &= Tr_E[|e_m\rangle\langle e_m| U(\rho \otimes |e_0\rangle\langle e_0|) U^\dagger | e_m\rangle\langle e_m|]. \end{aligned} \quad (3.18)$$

A situação apresentada em (3.18) difere de (3.15) pois, a medida está sendo realizada sobre o espaço do ambiente e não sobre o espaço do sistema principal. Esse processo é garantido pelo teorema da medida implícita⁴ (veja representação na figura 3.2) [13]. Temos ainda que,

$$Tr[S_m \rho S_m^\dagger] = Tr[|e_m\rangle\langle e_m| U(\rho \otimes |e_0\rangle\langle e_0|) U^\dagger | e_m\rangle\langle e_m|] = p(m). \quad (3.19)$$

⁴Se ao final de um processo computacional, alguns estados quânticos não tiverem sido medidos, pode-se assumir a medida efetuada.

A equação (3.19) fornece a ligação entre uma medida implícita [8], o postulado da medida (MQ) e os axiomas apresentados no primeiro tópico. Da equação (3.17) e da definição de uma OQ, temos que

$$\mathfrak{S}(\rho) = \sum_m \text{Tr}[S_m \rho S_m^\dagger] \frac{S_m \rho S_m^\dagger}{\text{Tr}[S_m \rho S_m^\dagger]} = \sum_m p(m) \rho_m. \quad (3.20)$$

Podemos então interpretar uma OQ como a ação de se tomar um estado ρ e trocá-lo aleatoriamente por ρ_m com probabilidade $\text{Tr}[S_m \rho S_m^\dagger]$ [8].

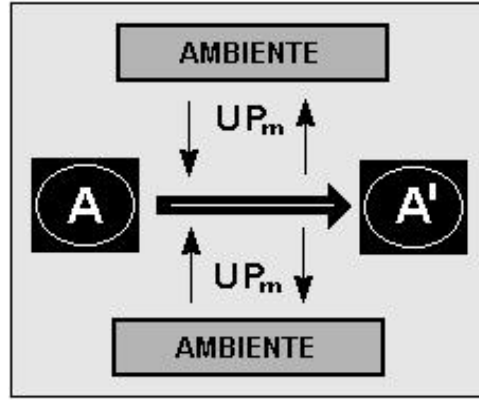


Figura 3.2: Esquematização da medida implícita
(figura modificada de [8], pag. 364)

É importante observar que essa interpretação usou a propriedade de *traço-preservado*.

3.6 Canais Quânticos

Sob o ponto de vista da Teoria de Informação [8,11-12,20,21,28], uma OQ pode ser vista como um canal quântico. Canais quânticos são sistemas físicos que levam alguma informação de um ponto X para um ponto Y . Os canais de maior interesse, são aqueles

que apresentam ruído ou, perda de informação. Essa interpretação pode ser útil quando se está analisando transmissão de informação e se pretende evitar ruídos. Nessa seção porém, utilizaremos os conceitos de “*canais quânticos*” afim de estender o conceito e a aplicabilidade do formalismo de OQ’s. Analizaremos o caso particular de um qubit afim de mostrar uma representação geométrica para o efeito dos diferentes ruídos num canal. Outra restrição será quanto ao tipo de mapeamento, isto é, a análise empregada será apenas para mapeamentos do tipo *traço-preservedo* [8,13].

3.6.1 Visualização Geométrica de Operações Quânticas

Escrevendo o qubit sobre a esfera de Bloch (Apêndice C) poderemos visualizar as mudanças que o estado quântico sofre devido a interação com o ambiente (ou após atravessar um canal). Relacionando o estado quântico de um qubit e o raio da esfera temos [8,13,29]:

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + r_z & r_x - ir_y \\ r_x + ir_y & 1 - r_z \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Para uma OQ tipo *traço-preservedo* podemos interpretar o mapeamento como uma ação sobre o raio \vec{r} do estado quântico ρ [8]

$$\vec{r} \xrightarrow{\mathfrak{S}} \vec{r}'. \quad (3.22)$$

Desta forma, após atravessar o canal, o raio \vec{r} sofre uma deformação de acordo com o tipo de operação determinada pelos superoperadores. A seguir, é mostrado uma lista dos tipos mais importantes de Canais Quânticos.

3.6.2 Canal Quântico Troca-de-Bit

O canal troca-de-bit (*bit flip*) modela a mudança do estado $|0\rangle$ para o estado $|1\rangle$, e do estado $|1\rangle$ para $|0\rangle$, com uma certa probabilidade $(1 - p)$. Ou, quando se mantêm intactos com probabilidade p . Na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ teremos:

1. $|x\rangle \rightarrow \sqrt{p}|x\rangle$,
2. $|x\rangle \rightarrow \sqrt{1-p}|y\rangle$; $x \neq y$.

Esse ruído pode ser representado por um mapeamento $\mathfrak{S}(\cdot)$ onde os elementos de operação são dados por [8,13]

$$S_0 = \sqrt{p}I = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_1 = \sqrt{1-p}X = \sqrt{1-p} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Podemos estimar o efeito do canal sobre o raio de um estado ρ a partir das definições (3.6) e (3.21). Esse efeito de deformação do canal *troca-de-bit* é tomado a partir da representação do raio como $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$. Deste modo o efeito pode ser particularizado em cada direção de ρ , adotando-se o seguinte procedimento:

1. Na direção- z tomamos $\vec{r} = (0, 0, 1)$.
2. Substituindo-se em (3.21) ρ fica:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

3. Aplicando-se (3.6) $\mathfrak{S}(\rho) = \rho' = (p)I\rho I + (1-p)X\rho X$.

Portanto,

$$\rho = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & 1-p \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

4. Comparando-se com (3.21):

$$\vec{r}' = (0, 0, 2p-1). \quad (3.26)$$

Para as demais direções executa-se o mesmo procedimento.

1. Na direção- y tomamos $\vec{r} = (0, 1, 0)$.

2. Substituindo-se em (3.21) ρ fica:

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

3. Aplicando-se (3.6) $\mathfrak{S}(\rho) = \rho' = (p)I\rho I + (1-p)X\rho X$.

Portanto,

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i(1-2p) \\ -i(1-2p) & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

4. Comparando-se com (3.21):

$$\vec{r}' = (0, 2p-1, 0). \quad (3.29)$$

1. Na direção- x tomamos $\vec{r} = (1, 0, 0)$

2. Substituindo-se em (3.21) ρ fica:

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

3. Aplicando-se (3.6) $\mathfrak{S}(\rho) = \rho' = (p)I\rho I + (1-p)X\rho X$.

Portanto,

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

4. Comparando-se com (3.21):

$$\vec{r}' = (1, 0, 0). \quad (3.32)$$

Portanto, para o canal troca-de-bit o raio do estado ρ sofre uma deformação dada por

$$\vec{r}' = (r_x, (2p-1)r_y, (2p-1)r_z), \quad (3.33)$$

ou seja, a esfera de Bloch sofre uma contração no plano- yz [8,13].

3.6.3 Canal Quântico Troca-de-Fase

O efeito desse canal é manter a fase (Apêndice C) do estado $|0\rangle$ inalterada com probabilidade p e inverter a fase do estado $|1\rangle$ com probabilidade $(1-p)$. Resumindo [8,13]:

1. $|0\rangle \rightarrow \sqrt{p}(+|0\rangle)$,
2. $|1\rangle \rightarrow \sqrt{1-p}(-|1\rangle)$.

Podendo ser expressado pelos superoperadores

$$S_0 = \sqrt{p}I = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_1 = \sqrt{1-p}Z = \sqrt{1-p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

O efeito desse canal pode ser verificado utilizando-se o procedimento anterior empregado no cálculo do canal *troca-de-bit*. Portanto, o raio após passar pelo canal fica com

$$\vec{r}' = ((2p-1)r_x, (2p-1)r_y, r_z). \quad (3.35)$$

A esfera de Bloch é projetada sobre o eixo- z enquanto as componentes x e y são contraídas.

3.6.4 Canal Quântico de Amortecimento-de-Amplitude (*Quantum Amplitude-Damping Channel*)

A interação de um sistema com o ambiente pode provocar perda de energia (Apêndice A) [16,21,22,28]. Um canal de *amortecimento-de-amplitude* é um modelo do decaimento de um estado excitado, devido a alguma emissão espontânea. Esse efeito pode ser visto como um tipo de ruído que “atenua” a função de onda associada ao sistema principal.

Para modelar esse canal vamos considerar, para o sistema principal, o estado padrão não-excitado como $|0\rangle$ e o excitado como $|1\rangle$. O efeito de atenuação pode ser descrito como a probabilidade p de, após um certo intervalo de tempo, o sistema principal dissipar energia e sair do estado $|1\rangle$ e ir para $|0\rangle$. O sistema terá então uma probabilidade $(1-p)$ de continuar no estado excitado [8,13]. Ou seja:

1. $|1\rangle \rightarrow \sqrt{p}|0\rangle$,
2. $|1\rangle \rightarrow \sqrt{1-p}|1\rangle$ (+ DECAIMENTO DA AMPLITUDE).

No formalismo de superoperadores esse efeito pode ser descrito como⁵ [8,13]

$$S_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \quad S_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Assim, S_1 induz um “salto quântico” no estado do sistema principal, correspondendo a perda de energia do mesmo. Já S_0 não muda o estado mas reduz a amplitude do estado

⁵É possível ainda generalizar esse processo abordando o caso onde existem efeitos de dissipação à temperatura finita. Esse fenômeno é de interesse principalmente para modelar redes de spins ou em experimentos de RMN [42].

$|1\rangle$. A esfera de Bloch após atravessar o canal fica com

$$\vec{r}' = (r_x\sqrt{1-p}, r_y\sqrt{1-p}, r_z(1-p) + p). \quad (3.37)$$

Isto é, sofre uma contração uniforme no plano- xy [8,13].

3.6.5 Canal Quântico de Amortecimento-de-Fase (*Quantum Phase-Damping Channel*)

Nos últimos parágrafos da introdução foi exposto a idéia básica do fenômeno de *descoerência*. Como dito, descoerência é um efeito exclusivo de sistemas quânticos e portanto pode ser elegantemente descrita por OQ's. O canal de *amortecimento-de-fase* modela esse efeito que, no contexto de canais quânticos, aparece como um ruído do canal. Esse ruído retira informação do sistema principal porém não retira energia do mesmo. Na descoerência, existe um “emaranhamento” entre as fases do sistema e sua vizinhança. O que esse efeito faz é destruir (exponencialmente) as superposições quânticas existentes no sistema principal [11,12,28,30,31].

Para modelar esse canal vamos assumir um espaço de estado tridimensional para o ambiente E cuja base será dada pelos estados $\{|E_0\rangle, |E_1\rangle, |E_2\rangle\}$. O sistema principal A será descrito por um espaço bidimensional onde $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ representa a base do mesmo. Nesse canal, o ruído sobre o sistema A pode ser resumido como [13]:

1. $|0\rangle|E_0\rangle \rightarrow \sqrt{1-p}|0\rangle|E_0\rangle + \sqrt{p}|0\rangle|E_1\rangle,$
2. $|1\rangle|E_0\rangle \rightarrow \sqrt{1-p}|1\rangle|E_0\rangle + \sqrt{p}|1\rangle|E_2\rangle.$

O mapeamento sobre a matriz densidade ρ , escrita sobre as bases do sistema A , pode ser descrito com os elementos de operação

$$S_0 = \sqrt{1-p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_1 = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad S_2 = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Após atravessar o canal, o estado do sistema A estará num estado cujo os termos da diagonal secundária (não-ortogonais), que relatam as superposições do sistema, podem sofrer decaimento de acordo com:

$$\mathfrak{S}(\rho) = \sum_i S_i \rho S_i^\dagger = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-p)\rho_{01} \\ (1-p)\rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Para enfatizarmos esse efeito sobre os termos não-diagonais, tomemos uma progressão temporal. Assumamos que a probabilidade de decaimento num intervalo de tempo Δt é dado por uma constante λ , ou seja, $p = \lambda \Delta t$. Vamos ainda admitir que a probabilidade p seja muito pequena em relação a unidade, tal que $\lambda \Delta t \ll 1$. Agora aplicando o canal *amortecimento-de-fase* n vezes sucessivamente no estado ρ , os elementos não-diagonais estarão sujeitos a um probabilidade de decaimento dada por [13]

$$\rho_{kl} \xrightarrow{\mathfrak{S}} (1-p)^n \rho_{kl}. \quad (3.40)$$

Considerando uma relação entre a aplicação do canal $\mathfrak{S}(\cdot)$ e a evolução temporal do sistema dada por $t = n\Delta t$, teremos:

$$(1-p)^n = (1 - \lambda \Delta t)^{t/\Delta t} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} e^{-\lambda t}. \quad (3.41)$$

Portanto, o efeito de descoerência diz que para um estado inicial na forma superposta $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, cujo operador densidade é dado por

$$\rho = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + \alpha\beta^*|0\rangle\langle 1| + \alpha^*\beta|1\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1|, \quad (3.42)$$

após um tempo $t \gg \lambda^{-1}$, o sistema decairá para o estado ortogonal

$$\rho = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1|. \quad (3.43)$$

Uma relação extremamente importante, que o formalismo de Operações Quânticas mostra, é dada entre o canal *de amortecimento-de-fase* e o canal *de troca-de-fase*. Do teorema da não-unicidade de representação do Operador-Soma ⁶ [8,13], pode-se mostrar que existe uma transformação $V = (v_{ij})$ tal que o canal *de amortecimento-de-fase* pode ser descrito por um canal *de troca-de-fase*. Neste caso, para (3.34) e (3.38) teremos

$$V = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{-1+2\alpha}{\alpha}} & 0 & -\sqrt{\frac{-\alpha-1}{\alpha}} \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2-2\alpha}{\alpha}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2-2\alpha}{1-\alpha}} & \sqrt{-\frac{1-2\alpha}{2\alpha}} \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2-2\alpha}{\alpha}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2-2\alpha}{1-\alpha}} & \sqrt{-\frac{1-2\alpha}{2\alpha}} \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

onde $\alpha = (1 - 2p)/2$, quando adotamos alpha no lugar de p em (3.38).

Dessa relação podemos inferir a atuação desse canal na fase dos estados relativos ao sistema principal. Além disso, como dito, a superposição de estados é caracterizada justamente pela coerência das fases de cada estado. O acoplamento com o ambiente gera uma interferência entre as fases de cada sistema, gerando um emaranhamento entre estados.

A descoerência pode ser ainda vista como o acoplamento de um sistema com “um número muito grande” de micro-estados (muitos graus de liberdade), que descrevem o ambiente, com um outro sistema com poucos graus de liberdade. A diferença média de energia

⁶Duas representações distintas de superoperadores, $\{F_i\}$ e $\{E_j\}$, para um mesmo sistema, serão iguais se e somente se existir um v_{ij} complexo tal que $E_i = \sum_{ij} v_{ij} F_j$.

entre os níveis vizinhos é extremamente pequena, gerando uma grande sensibilidade à perturbações forçando um equilíbrio no sistema total. Desta forma, as principais características do efeito de descoerência, que estão intimamente ligadas, são: muitos graus de liberdade, sensibilidade a perturbações e tendência de estados se tornarem ortogonais no tempo [12].

A figura 3.3 mostra um esquema de construção de um circuito para este canal:

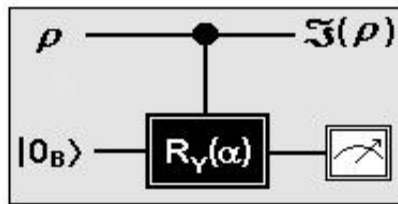


Figura 3.3: Circuito amortecimento-de-fase, com $R_Y(\alpha) = \exp(-i\alpha Y/2)$
(figura modificada de [8], pag. 385)

Através de OQ's, podemos interpretar o canal de *amortecimento-de-fase*, como um efeito de descoerência a tempo discreto [8].

O efeito de *amortecimento-de-fase* é um ruído inevitável para sistemas abertos e/ou sistemas macroscópicos. Esse tem sido tema de grande discussão para o entendimento de porque o mundo clássico é ortogonal (sem superposições de estados) ou, em outras palavras, na explicação do colapso da função de onda durante os processos de medida [12,13,31].

Capítulo 4

Aplicação em Sistemas Biológicos

Este capítulo será dedicado à aplicação do formalismo das Operações Quânticas no modelo Teórico de Fröhlich. Fröhlich desenvolveu uma teoria quântica para sistemas biológicos em geral [18,19,32-35].

Do ponto de vista termodinâmico qualquer sistema biológico é um sistema aberto longe do equilíbrio térmico [31]. A característica mais controversa e complexa é o ordenamento que todo sistema biológico apresenta. Por ser um sistema aberto, a irreversibilidade e a desordem deveriam prevalecer sobre tais sistemas. Porém, uma outra característica forte em bio-sistemas é a não-linearidade. É desta não-linearidade, acrescida de um suprimento de energia adequado, que pode haver ordenamento sobre o sistema ¹ (Apêndice A) [21].

Por outro lado, fisicamente, um sistema biológico pode ser reduzido à interação entre biomoléculas. Essa interação pode ser modelada como sistemas oscilatórios (ou vibracionais) vinculados. Biomoléculas (proteínas, enzimas, etc) apresentam comportamento

¹Qualquer tipo de organização depende da diferença entre a energia interna e o calor absorvido do meio.

oscilatório predominante para a realização de suas tarefas. Uma das características mais importantes em sistemas oscilatórios, é que estes podem acumular energia em certos modos de vibração. E, o fluxo de energia² tem papel fundamental na mudança e controle dos modos de vibração dessas moléculas [19,21,32,33].

O ordenamento presente nos sistemas biológicos pode revelar uma espécie de *cooperação* entre as componentes do sistema. Essa *cooperação* é caracterizada pelo transporte de massa, energia e informação. Além disso pode gerar o que se entende por *regiões coerentes*.

A idéia de coerência em sistemas biológicos foi inicialmente introduzida por Herbert Fröhlich [18,32,33]. Fröhlich considerou as propriedades de polarização dos constituintes biológicos. Estes constituintes apresentam campos eletromagnéticos que mediam interações entre as partes do sistema, funcionando como agente ordenador [32]. Além disso, Fröhlich utilizou os princípios de não-linearidade. A não-linearidade em sistemas oscilatórios permite a transferência de energia entre diferentes modos de vibração. A energia pode ser ‘canalizada’ tanto de altas frequências de oscilação para baixas, quanto de baixas frequências para altas. Portanto, a energia fornecida para um sistema não-linear não termaliza imediatamente e pode condensar em certos modos normais de vibração³. Alguns modos de vibração, quando em alta excitação, podem manter a relação de suas fases e amplitudes invariantes no tempo e no espaço. Essa é justamente a característica necessária para coerência [12,21,18].

²A energia em bio-sistemas normalmente é transportada por moléculas especializadas. A ATP (adenosina de trifosfato) e GTP (guanosina de trifosfato) são as mais comuns. Ambas fornecem energia a partir da liberação de um fósforo [5,43].

³Somente alguns graus de liberdade são excitados enquanto o sistema como um todo parece se manter no equilíbrio térmico.

A aproximação de sistemas biológicos e suas vizinhanças por osciladores harmônicos acoplados permite a descrição da energia absorvida em termos de uma vibração não-linear, balanceada com a energia perdida⁴. Dependendo da energia absorvida e da liberada para o ambiente, o sistema pode mudar de um regime de incoerência para um regime de coerência [19,34].

Sistemas coerentes, que transportam energia condensada, podem conter informação; essa informação é dependente da distribuição da energia condensada ou o quanto o sistema está fora do equilíbrio termodinâmico [21]. A transferência de informação em bio-sistemas pode ainda ser mediada por campos eletromagnéticos. A natureza oscilatória e eletromagnética em sistemas biológicos é a principal característica empregada por Fröhlich na construção de seu modelo [32].

⁴Em geral, modelos que introduzem termos não-harmônicos mostram poucos melhoramentos [21].

4.1 O Hamiltoniano de Fröhlich

Para montar o modelo de Fröhlich é preciso três constituintes básicos [21]:

1. *um sistema oscilatório;*
2. *uma fonte de energia;*
3. *um banho térmico.*

Um sistema oscilatório aqui será definido por um sistema que contém um número suficientemente grande de sub-unidades oscilantes que apresentam carga dipolar ou multipolar. Essa carga produz um campo eletromagnético responsável pela interação entre as sub-unidades resultando numa banda de modos normais com diferentes frequências [21]. Para excitar as sub-unidades é necessário que a fonte de energia esteja acoplada ao sistema (em verdade, elas podem ocupar a mesma região). O nível de excitação de cada sub-unidade do sistema depende da energia fornecida ao mesmo. Deste modo, a fonte de energia representa uma parte do ambiente.

O banho térmico representa a parte complementar do meio ambiente o qual está acoplado ao sistema principal. Esse acoplamento modelará a perda de energia do sistema principal para o ambiente. No entanto, devido ao tipo de acoplamento, pode haver também um refluxo de energia fazendo com que o banho térmico funcione como uma segunda fonte de energia, figura 4.1. A combinação de emissão e absorção permite uma transferência de energia entre os modos normais com diferentes frequências; esse tipo de interação pode, muitas vezes, aparecer de forma não-linear⁵ [21].

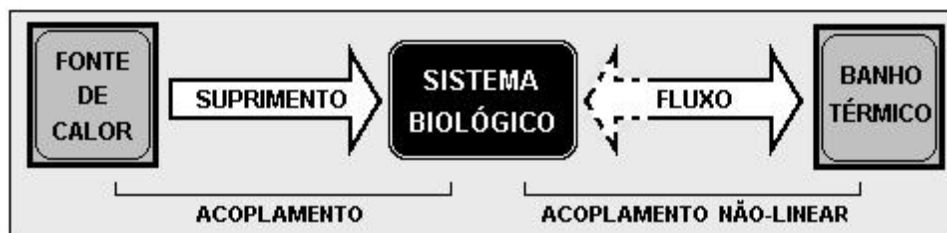


Figura 4.1: Esquema das características termodinâmicas do modelo de Fröhlich
(figura modificada de [21], pag. 26)

De fato, o meio ambiente biológico é uma estrutura extremamente complexa. No meio intra ou extra celular, por exemplo, pode-se encontrar desde de átomos, pequenas moléculas até grandes polímeros [36]. Essa estrutura fornece na realidade um mecanismo de troca de energia muito mais complexo incluindo colisões, interações de Coulomb, trocas térmicas e etc [21]. A primeira aproximação no modelo será considerar o ambiente (como um todo) como uma coleção de osciladores acoplados ao sistema (Apêndice C).

Os maiores avanços no estudo do modelo de Fröhlich foram devidos principalmente a [19,34]. Em [21] também existe uma grande discussão sobre a estabilidade das soluções do modelo de Fröhlich. Eles descreveram as interações entre sistema e ambiente a partir de um modelo quântico oscilatório em dois modos de vibração (absorção e emissão) com diferentes frequências. A partir de seus resultados, eles definiram quatro regimes de oscilação para o bio-sistema: *incoerente*, *coerente de tempo limitado*, *coerente constante* e *super coerente*⁶. Dependendo da energia fornecida (e da perda), o sistema pode mudar de um regime

⁵Essa não-linearidade é verificada calculando-se o o valor médio do número de ocupação n a partir da relação $\langle \dot{N} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [N, H] \rangle$, onde $N|n\rangle = a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$. Dessa relação mede-se a taxa de transferência (não-linear) de energia de um modo de vibração para outro [13,21,38,39].

⁶Um sistema *super coerente* é aquele que apresenta um aumento da coerência em função tempo.

incoerente para um dos regimes coerentes.

Para analisar estas questões vamos tomar o Hamiltoniano para descrever o modelo de Fröhlich, também conhecido como Hamiltoniano de Wu-Austin, que pode ser escrito na forma [21,34]:

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad (4.1)$$

onde

$$H_1 = \sum_i \hbar \omega_i a_i^\dagger a_i + \sum_j \hbar \nu_j b_j^\dagger b_j + \sum_k \hbar \mu_k c_k^\dagger c_k,$$

$$H_2 = \sum_i \sum_j \hbar (\lambda a_i b_j^\dagger + \lambda^* a_i^\dagger b_j) + \sum_k \sum_i \hbar (\eta c_i a_j^\dagger + \eta^* c_i^\dagger a_j), \quad (4.2)$$

$$H_3 = \sum_l \sum_i \sum_j \hbar (\xi a_l^\dagger a_i b_j^\dagger + \xi^* a_l^\dagger a_i b_j).$$

O Hamiltoniano (4.1) descreve o sistema biológico como uma coleção de osciladores harmônicos acoplados. Os termos ω , a_i^\dagger e a_i representam respectivamente a frequência, o operador de criação e o operador de aniquilação do sistema principal. O bio-sistema oscila na frequência ω_i devido as interações do campo eletromagnético produzido pelas sub-unidades vizinhas (o termo \hbar é a constante de Plank dividida por 2π). O segundo termo em H_1 carrega informação sobre o banho térmico onde ν_j , b_j^\dagger e b_j representam respectivamente a frequência de vibração, o operador criação e o operador aniquilação. O terceiro termo está associado à fonte de energia, sendo μ , c^\dagger e c a frequência, operador criação e operador aniquilação, respectivamente. O Hamiltoniano H_2 descreve com o primeiro termo o acoplamento entre o sistema biológico e o banho térmico — mediado pelas constantes de acoplamento λ^* e λ . Com o segundo termo, descreve o acoplamento entre o sistema biológico e a fonte de energia — com as constantes de acoplamento η^* e η . Chamaremos esse tipo de acoplamento

de *acoplamento de primeira ordem*. O Hamiltoniano H_3 descreve o *acoplamento* entre dois modos de vibração do sistema biológico com o banho térmico — com as constantes de acoplamento ξ e ξ^* . Esse acoplamento, o qual chamaremos de *acoplamento de segunda ordem*, é essencial para possibilitar uma sustentação da coerência quântica em sistemas biológicos à temperaturas como a do corpo humano [21]. A partir dele surge a possibilidade de condensação de energia no sistema principal através da transferência de energia entre os modos de vibração do sistema e do banho térmico. A vibração do sistema pode ser linear mas através do acoplamento com o banho térmico aparecem efeitos não-lineares [21].

4.2 Modelo de Fröhlich como uma OQ

O objetivo deste tópico é aplicar o formalismo de Operações Quânticas no sistema biológico descrito pelo modelo de Fröhlich. Para tal aplicação, precisamos encontrar a operação unitária que descreve a evolução do sistema conjunto ambiente/bio-sistema. Essa operação unitária pode ser derivada da equação (2.8). A equação (2.9) é válida pois estamos considerando o conjunto formado pelo sistema biológico mais o ambiente como um sistema fechado e o Hamiltoniano independente do tempo [36-38,40]. Portanto, substituindo (4.1) em (2.9) teremos a transformação unitária que governa a evolução do sistema conjunto:

$$\begin{aligned}
 U(t, t_0 = 0) = \exp \left[-it \left(\sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n + \sum_j \nu_j b_j^\dagger b_j + \sum_k \mu_k c_k^\dagger c_k \right. \right. \\
 \left. \left. \sum_n \sum_j (\lambda a_n b_j^\dagger + \lambda^* a_n^\dagger b_j) + \sum_k \sum_n (\eta c_n a_j^\dagger + \eta^* c_n^\dagger a_j) \right. \right. \\
 \left. \left. \sum_l \sum_n \sum_j (\xi a_l^\dagger a_n b_j^\dagger + \xi^* a_l^\dagger a_n b_j) \right) \right].
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

O próximo passo é encontrar os superoperadores que atuam no sistema principal. Entretanto, dada a complexidade do Hamiltoniano precisaremos fazer algumas considerações. Para estudarmos os efeitos de cada termo do Hamiltoniano total (4.1), a melhor estratégia de cálculo é “separar” cada parte. Esse estudo é importante pois mostrará os ruídos que cada termo insere isoladamente no sistema. A partir do estudo prévio que caracterizou os tipos possíveis de canais num sistema quântico, será possível mostrar um paralelo com tais canais elucidando as características físicas inerentes ao Hamiltoniano de Fröhlich. Dessa análise, será possível a visualização da correspondência entre os processos computacionais atribuídos a um oscilador harmônico e o modelo biológico proposto por

Fröhlich.

4.2.1 Considerações e Métodos

Para calcularmos os superoperadores associados ao sistema principal (sistema biológico), representado por ρ , vamos tomar as bases do ambiente, *fonte de energia* e *banho térmico* respectivamente, como $\{|C_s\rangle\}$ e $\{|B_k\rangle\}$, tal que

$$S_{ks} = \langle B_k C_s | U | B_0 C_0 \rangle, \quad (4.4)$$

onde a *fonte de energia* começa num estado $|C_0\rangle$ e o *banho térmico* num $|B_0\rangle$. Assim:

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}(\rho) &= Tr_{BC}[U(\rho \otimes |B_0\rangle\langle B_0| \otimes |C_0\rangle\langle C_0|)U^\dagger] \\ &= \sum_k \sum_s \langle B_k C_s | U(\rho \otimes |B_0\rangle\langle B_0| \otimes |C_0\rangle\langle C_0|)U^\dagger | B_k C_s \rangle \\ &= \sum_{ks} S_{ks} \rho S_{ks}^\dagger. \end{aligned} \quad (4.5)$$

No entanto, dada a complexidade que a transformação unitária pode assumir, é extremamente válido a introdução de uma relação derivada da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff (BCH)⁷ [8]. Através desta relação será possível expressar uma dependência entre os operadores do sistema principal e os demais sistemas. Assim, o operador evolução pode ser reescrito num formato mais simplificado e compacto auxiliando no cálculo dos superoperadores. Então a partir de (BCH) inferimos que

$$\exp(\varkappa R) A \exp(-\varkappa R) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varkappa^n}{n!} C_n, \quad (4.6)$$

⁷A fórmula de BCH diz que se dois operadores A e B não comutam então para um número λ vale $e^{(A+B)\lambda} = e^{A\lambda} e^{B\lambda} e^{-[A,B]\lambda^2} + O(\lambda^3)$.

onde \varkappa é um número complexo e A , R e C são operadores, valendo a recursão

$$C_0 = A, \quad C_1 = [R, C_0], \quad \dots, \quad C_n = [R, C_{n-1}]. \quad (4.7)$$

o operador R é definido de acordo com a expressão do Hamiltoniano do sistema tratado.

A partir das relações de comutação (B.5) apresentadas no Apêndice B, pode-se separar o sistema principal em subsistemas que operem apenas no seu próprio espaço. Para o sistema principal isolado e completamente desacoplado do ambiente, temos $H = \sum_i \hbar\omega_i a_i^\dagger a_i$. A energia pode ser então calculada tomando-se apenas um subsistema q de H ,

$$H_q |n_q\rangle = \hbar\omega_q n_q |n_q\rangle, \quad (4.8)$$

tal que o espaço do conjunto total de osciladores corresponde ao produto tensorial [8,11-13] na forma:

$$|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_q\rangle \dots = |n_1, n_2, \dots, n_q, \dots\rangle. \quad (4.9)$$

Portanto, de (4.8) e (4.9), vale a notação:

$$|A_n B_0 C_0\rangle = |A_n^0 \dots A_n^r \dots B_0^0 \dots B_0^r \dots C_0^0 \dots C_0^r \dots\rangle. \quad (4.10)$$

tal que o *ket* $|X_n\rangle$ diz respeito ao “ n -ésimo” nível de energia do “ r -ésimo” oscilador do sistema X — com $X = A$ (sistema principal), B (banho térmico) ou C (fonte de calor)⁸. Assim, para o caso particular onde existem apenas a oscilação livre dos sistemas ($\lambda = \eta = \xi \sim 0$) — principal, fonte de calor e banho térmico — teremos a evolução do conjunto dada por

$$U_1(t, t_0 = 0) = \exp \left[-it \left(\sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n + \sum_j \nu_j b_j^\dagger b_j + \sum_k \mu_k c_k^\dagger c_k \right) \right], \quad (4.11)$$

⁸Quando for omitido o índice referente ao sub-sistema de osciladores, estará subentendido que o espaço tomado é o referente ao subsistema r , ou seja, $|A^r B^r C^r\rangle$. Do contrário será especificado.

Este é um caso particular de desacoplamento ou de acoplamento fraco. Logo, o Hamiltoniano (4.1) se reduz a H_1 que representa três conjuntos de osciladores independentes, oscilando com frequências distintas. Chamaremos de U_1^r o operador que governa a evolução de um subsistema r correspondente ao termo H_1 de (4.1), tal que:

$$U_1^r(t, t_0 = 0) = \exp \left[-it \left(\omega_r a_r^\dagger a_r + \nu_r b_r^\dagger b_r + \mu_r c_r^\dagger c_r \right) \right]. \quad (4.12)$$

O próximo passo então é aplicarmos esses métodos para os termos de (4.1) que apresentam algum tipo de acoplamento com o ambiente.

4.2.2 Canal de Amortecimento-de-Amplitude no Modelo de Fröhlich

O efeito desse canal pode ser dado pelo termo H_2 do Hamiltoniano de Fröhlich (4.1). Para tal, estamos interessados apenas no comportamento dos termos acoplados nesse domínio. Considerando, portanto, a situação física onde os termos de acoplamento λ e η são muito maiores que as frequências de oscilação de cada conjunto de osciladores, assim como o acoplamento de segunda ordem — mediado por ξ — teremos:

$$\omega_i = \mu_i = \nu_i \sim 0, \quad \forall i, \quad \xi \sim 0. \quad (4.13)$$

Desta maneira reduzimos o Hamiltoniano (4.1) a H_2 . Considerando ainda η e λ reais, e os casos para $\lambda \gg \eta$ e $\eta \gg \lambda$, respectivamente teremos:

$$H_{2,1} = \sum_i \sum_j \hbar \lambda (a_i b_j^\dagger + a_i^\dagger b_j), \quad H_{2,2} = \sum_k \sum_i \hbar \eta (c_k a_i^\dagger + c_k^\dagger a_i). \quad (4.14)$$

Dadas as considerações anteriores, teremos um operador evolução para cada situação, governando a evolução de cada subsistema, dados por

$$U_{2,1}^r = \exp[-it\lambda(a_r b_r^\dagger + a_r^\dagger b_r)], \quad U_{2,2}^d = \exp[-it\eta(c_d a_d^\dagger + c_d^\dagger a_d)]. \quad (4.15)$$

Essa separação é proposta haja visto que os termos $H_{2,1}$ e $H_{2,2}$ descrevem a mesma situação física. A diferença se deve apenas porque, no modelo proposto por Fröhlich, existe a distinção entre *banho térmico* e *fonte de calor*. Entretanto, na prática, essa diferenciação é delicada quando não inexistente [21]. Dada ainda a proposta de comparação dos atributos computacionais inerentes ao modelo, faz-se totalmente conveniente o tratamento apenas de um dos termos. Portanto, calculando os superoperadores associados ao operador $U_{2,1}^r$, teremos

$$S_{ks}^{r2,1} = \langle B_k C_s | U_{2,1}^r | B_0 C_0 \rangle. \quad (4.16)$$

Valendo as mesmas considerações anteriores quanto as bases do ambiente $\{|B_k\rangle, |C_s\rangle\}$ e quanto ao estado inicial $\{|B_0\rangle, |C_0\rangle\}$ do mesmo. Para simplificação de cálculo devemos encontrar o operador $U_{2,1}^r a_r^\dagger (U_{2,1}^r)^\dagger$. Desta maneira, aplicando a relação de BCH (4.6) teremos:

$$A \equiv a_r^\dagger, \quad R \equiv a_r b_r^\dagger + a_r^\dagger b_r, \quad \varkappa = -it\lambda. \quad (4.17)$$

Das relações de comutação:

$$C_0 = a_r^\dagger, \quad C_1 = b_r^\dagger, \quad C_2 = a_r^\dagger, \quad \dots, \quad C_{n-1} = b_r^\dagger, \quad C_n = a_r^\dagger \quad (4.18)$$

que, substituídas em (4.6), produz

$$U_{2,1}^r a_r^\dagger U_{2,1}^{r\dagger} = a_r^\dagger \cos(\lambda t) - i b_r^\dagger \sin(\lambda t). \quad (4.19)$$

Verifica-se que a operação $U_{2,1}^r$ no estado fundamental do sistema global $U_{2,1}^r|A_0B_0C_0\rangle = |A_0B_0C_0\rangle$ é invariante, portanto vale o seguinte procedimento:

$$\begin{aligned}
U_{2,1}^r|A_nB_0C_0\rangle &= U_{2,1}^ra_r^\dagger|A_{(n-1)}B_0C_0\rangle \\
&= U_{2,1}^ra_r^\dagger U_{2,1}^{r\dagger}U_{2,1}^r|A_{(n-1)}B_0C_0\rangle = \\
&\dots = (U_{2,1}^ra_r^\dagger U_{2,1}^{r\dagger})^n |A_0B_0C_0\rangle.
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Aplicando a relação (4.19) e as propriedades de a_r^\dagger e b_r^\dagger apresentadas no Apêndice B, teremos

$$\begin{aligned}
U_{2,1}^r|A_nB_0C_0\rangle &= \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \cos^l(\lambda t) \sin^{n-l}(\lambda t) (a_r^\dagger)^l (b_r^\dagger)^{n-l} |A_0B_0C_0\rangle \\
&= \sum_{l=0}^n f(n, l) |A_lB_{n-l}C_0\rangle.
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Lembrando que a_r^\dagger e b_s^\dagger comutam para quaisquer r e s e que foi empregado o teorema da não-unicidade com $f(n, l)$ definida por

$$f(n, l) \equiv \left[\binom{n}{l} (1-p)^l p^{n-l} n! \right]^{1/2} \tag{4.22}$$

onde $p = \sin^2(\lambda t)$ e $\binom{n}{l}$ é o binômio de Newton.

A expressão (4.4) representa cada superoperador na forma matricial. Para representá-los na forma de operadores inserimos o estado do sistema principal, considerando toda sua base de espaço, tal que da relação de completeza [8,11]:

$$S_{ks}^{r2,1} = \sum_m \sum_n \langle A_m B_k C_s | U_{2,1}^r | A_n B_0 C_0 \rangle | A_m \rangle \langle A_n |. \tag{4.23}$$

Usando (4.21) temos que

$$\begin{aligned}
S_{ks}^{r2,1} &= \sum_m \sum_n \sum_{l=0}^n \delta_{ml} \delta_{k(n-l)} \delta_{s0} f(n, l) |A_m\rangle \langle A_n| \\
&= \sum_n \sum_{l=0}^n \delta_{k(n-l)} \delta_{s0} f(n, l) |A_l\rangle \langle A_n|,
\end{aligned} \tag{4.24}$$

e portanto

$$S_{k0}^{r2,1} = \sum_n f(n, n-k) |A_{n-k}\rangle \langle A_n|, \tag{4.25}$$

onde o termo $\delta_{k(n-l)}$ impõe que $n - k = l$ permitindo assim a junção dos somatórios “ $\sum_n \sum_{l=0}^n = \sum_n$ ” — válida somente para $n \geq k$.

Pode-se utilizar o mesmo procedimento para o cálculo dos superoperadores no acoplamento com a fonte de calor (dado por $H_{2,2}$). A diferença no resultado final estará apenas na atuação de $U_{2,2}^r$ sobre o estado conjunto $|A_0 B_0 C_0\rangle$:

$$\begin{aligned}
U_{2,2}^r |A_n B_0 C_0\rangle &= (U_{2,2}^r a_q^\dagger U_{2,2}^{r\dagger})^n |A_0 B_0 C_0\rangle \\
&= \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \cos^l(\eta t) \sin^{n-l}(\eta t) (a_d^\dagger)^l (c_d^\dagger)^{n-l} |A_0 B_0 C_0\rangle \\
&= \sum_{l=0}^n f(n, l) |A_l B_0 C_{n-l}\rangle
\end{aligned} \tag{4.26}$$

produzindo, de forma análoga

$$S_{0s}^{r2,2} = \sum_n f(n, n-s) |A_{n-s}\rangle \langle A_n| \tag{4.27}$$

onde novamente tomou-se $p = \sin^2(\eta t)$ com $f(n, l)$ definida por (4.22).

As expressões (4.24) e (4.27) representam uma generalização, em níveis de energia, para o *canal de amortecimento-de-amplitude*. Assim, os cálculos apresentados foram para um espaço de dimensão N (finita) — tanto para o sistema principal quanto para o ambiente.

Portanto, implica que os índices, referente a cada subsistema, correm $\{n, k, s\} = 0, \dots, N-1$.

Para um sistema particular de 2 *níveis* teremos um espaço de Hilbert bidimensional ou, $N = 2$ implicando em $\{n, k, s\} = 0, 1$. Aplicando essa particularização em (4.27), teremos

$$S_{0s}^{r2,2} = f(0, 0-s)|A_{0-s}\rangle\langle A_0| + f(1, 1-s)|A_{1-s}\rangle\langle A_1|. \quad (4.28)$$

Para os casos em que $s = 0$ e $s = 1$, obtem-se respectivamente

$$S_{00}^{r2,2} = |A_0\rangle\langle A_0| + \sqrt{1-p}|A_1\rangle\langle A_1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

$$S_{01}^{r2,2} = \sqrt{p}|A_0\rangle\langle A_1| = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

O mesmo pode ser feito para (4.24).

4.2.3 Canal de Amortecimento-de-Fase no Modelo de Fröhlich

Iremos agora inferir o canal de *amortecimento-de-fase* a partir de H_3 do Hamiltoniano de Fröhlich (4.1). Para analisarmos isoladamente esse termo teremos de considerar a situação física onde o tipo de acoplamento revelado por H_3 (acoplamento de segunda ordem) seja muito mais relevante que os demais mas com frequências de oscilação baixas. Pode-se conseguir esse sistema físico considerando

$$\omega_i = \mu_i = \nu_i \sim 0, \quad \forall i, \quad \lambda = \eta \sim 0. \quad (4.31)$$

Desta forma, reduzimos o Hamiltoniano (4.1) a H_3 . Considerando ainda o caso em que ξ é real e efetuando-se todas as considerações anteriores, teremos um operador evolução U_3^r , para um sub-sistema particular de H_3 — de um espaço particular r — é dado por

$$U_3^r = \exp \left[-it\xi (a_r^\dagger a_r b_r^\dagger + a_r^\dagger a_r b_r) \right]. \quad (4.32)$$

Aplicando (4.6), teremos:

$$A \equiv a_r^\dagger, \quad R \equiv a_r^\dagger a_r b_r^\dagger + a_r^\dagger a_r b_r, \quad \varkappa = -it\xi. \quad (4.33)$$

Das relações de comutação, encontra-se os coeficientes:

$$C_0 = a_r^\dagger, \quad C_1 = (b_r + b_r^\dagger) a_r^\dagger, \quad C_2 = (b_r + b_r^\dagger)^2 a_r^\dagger, \quad \dots, \quad C_m = (b_r + b_r^\dagger)^m a_r^\dagger \quad (4.34)$$

que produzem a relação:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\varkappa^m}{m!} C_m = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\varkappa^m}{m!} (b_r + b_r^\dagger)^m a_r^\dagger = U_3^r a_r^\dagger U_3^{r\dagger}. \quad (4.35)$$

Portanto:

$$\begin{aligned} U_3^r |A_n B_0 C_0\rangle &= \left(U_3^r a_r^\dagger U_3^{r\dagger} \right)^n |A_0 B_0 C_0\rangle \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(n\varkappa)^m}{(m!)(n!)^{-1/2}} (b_r + b_r^\dagger)^m |A_n B_0 C_0\rangle. \end{aligned} \quad (4.36)$$

O problema agora é conhecer a regra de aplicação de $(b_r + b_r^\dagger)^m$ no estado $|B_0\rangle$. A não-comutatividade de b^\dagger e b gera uma expressão recursiva. Esse problema pode ser descrito como o de conhecer os coeficientes da expressão:

$$(b + b^\dagger)^m |B_0\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} g(m, j) |B_j\rangle, \quad (4.37)$$

onde o termo $g(m, j)$ é um coeficiente dependente de dois índices, sendo o índice j limitado pelo tamanho do espaço do sistema. O cálculo detalhado do coeficiente $g(m, j)$ é apresentado no Apêndice D.

Portanto, a partir dessa relação, tem-se que:

$$U_3^r |A_n B_0 C_0\rangle = \sum_m^\infty \sum_{j=0}^{N-1} \frac{(-int\xi)^m}{(m!)(n!)^{-1/2}} g(m, j) |A_n B_j C_0\rangle, \quad (4.38)$$

e os superoperadores associados ficam:

$$\begin{aligned} S_{ks}^{r3} &= \sum_v \sum_n \langle A_v B_k C_s | U_3^r |A_n B_0 C_0\rangle |A_v\rangle \langle A_n| \\ &= \sum_n \delta_{nn} \delta_{s0} \sum_m^\infty \sum_{j=0}^{N-1} \frac{(-int\xi)^m}{(m!)(n!)^{-1/2}} g(m, j) \delta_{kj} |A_n\rangle \langle A_n|. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Logo,

$$S_{k0}^{r3} = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^\infty \frac{(-int\xi)^m}{(m!)(n!)^{-1/2}} g(m, k) |A_n\rangle \langle A_n|. \quad (4.40)$$

A expressão (4.40) fornece a generalização do *canal de amortecimento-de-fase* sobre o sistema principal. Este é o termo responsável pelo efeito de descoerência sobre superposições quânticas possíveis no sistema biológico de Fröhlich.

Resta agora mostrar a correspondência entre essa expressão geral e os superoperadores particulares apresentados anteriormente em (3.38). Como no canal de *amortecimento-de-amplitude*, para um sistema particular de 2 *níveis*, teremos $\{n, k, s\} = 0, 1$. Aplicando essa particularização em (4.40), teremos para $k = 0$ e $k = 1$, respectivamente:

$$\begin{aligned} S_{00}^{r3} &= \sum_{n=0}^1 \sum_{m=0}^\infty \frac{(-int\xi)^m}{(m!)(n!)^{-1/2}} g(m, 0) |A_n\rangle \langle A_n|, \\ S_{10}^{r3} &= \sum_{n=0}^1 \sum_{m=0}^\infty \frac{(-int\xi)^m}{(m!)(n!)^{-1/2}} g(m, 1) |A_n\rangle \langle A_n|. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Das relações e resultados do Apêndice D temos que, para $N = 2$:

$$g(m, 0) = \begin{cases} 1 & , \quad \forall m \text{ par} \\ 0 & , \quad \forall m \text{ ímpar} \end{cases} \quad \text{e} \quad g(m, 1) = \begin{cases} 0 & , \quad \forall m \text{ par} \\ 1 & , \quad \forall m \text{ ímpar} \end{cases} \quad (4.42)$$

Desta maneira, tem-se que para $g(m, 0)$ a série em m converge para a função cosseno e para $g(m, 1)$ converge para a função seno. Logo,

$$S_{00}^{r3} = |A_0\rangle\langle A_0| + \cos(t\xi)|A_1\rangle\langle A_1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \quad (4.43)$$

$$S_{10}^{r3} = \sin(t\xi)|A_1\rangle\langle A_1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{p} \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

onde tomou-se $p = \sin^2(t\xi)$

Através do teorema da não-unicidade, encontramos as matrizes W e V que, aplicadas sucessivamente em (4.43) e (4.44), fornecem os superoperadores encontrados em (3.38); sendo W definida por:

$$W = \begin{pmatrix} \alpha & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1-(2\alpha-1)^2}{\alpha}} \\ \frac{1-\alpha}{\sqrt{1-\alpha}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1-(2\alpha-1)^2}{\alpha}} \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

onde $\alpha = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1-p})$.

A matriz W leva (4.43) e (4.44) nos superoperadores do *canal troca-de-fase*. Assim, basta aplicar V , definida por (3.44), para resgatarmos o *canal de amortecimento-de-fase* como calculado. Fecha-se portanto, a ponte entre o modelo quântico-biológico proposto por Fröhlich e o formalismo de OQ's.

Capítulo 5

Conclusões

O presente texto teve como principal objetivo tratar sistemas biológicos, pelo modelo teórico de Fröhlich, com o formalismo matemático de Operações Quânticas. O modelo de Fröhlich estuda as possibilidades de efeitos quânticos serem relevantes em sistemas biológicos; enquanto Operações Quânticas ajudam na caracterização desses efeitos quânticos para um formato computacional a sistema aberto. A partir dessa caracterização torna-se possível uma ponte entre Computação Quântica e processos biológicos. Essa ponte pode revelar propriedades desconhecidas ou ajudar na compreensão da dinâmica microbiológica.

Para tanto, inicialmente buscou-se uma sumarização dos principais conceitos dentro da teoria da computação quântica (e clássica). Fez-se uma revisão detalhada do formalismo de Operações Quânticas para descrição de processos físicos e computacionais. A partir daí, apontou-se os principais requisitos para a construção do modelo teórico de Fröhlich ou, para a modelagem de sistemas biológicos sob a ótica do formalismo quântico.

Aplicando o formalismo de OQ's no modelo de Fröhlich ficou natural o tratamento

quântico de bio-sistemas. Isso porque o formalismo explicita fenômenos somente encontrados em tais sistemas físicos. Além disso, devido a caracterização de tempo discreto que OQ's fornece, pôde-se construir a ponte desejada para um tratamento computacional de maneira simples e direta. Ou seja, aplicando um formalismo direcionado para sistemas quânticos, em sistemas biológicos, revelamos também um possível caráter computacional para esses bio-sistemas.

As características computacionais surgem com a abordagem do problema (interação física de subsistemas) como canais de informação quânticos — *canal de amortecimento-de-amplitude* e *canal de amortecimento-da-fase*¹. Dessa abordagem, enfoca-se os ruídos típicos presentes numa transferência e/ou processamento de informação. O modelo de Fröhlich portanto, “revela” canais fundamentais dentro da Teoria Quântica de Informação.

Logo, dessa análise, podemos tentar elucidar as diversas formas pela qual a natureza se vale para transferir e processar informação. Dependendo do contexto biológico, essa pode ser a chave para o entendimento de como certos fenômenos biológicos aparecem e/ou interagem de forma tão coordenada e eficiente. No cérebro por exemplo, esse tratamento poderia ser de vital importância para explicar porque e como certas funções mentais surgem, ou como certas relações fisiológicas podem ocorrer a tempo ótimo de processamento.

Além disso, estudar os efeitos ruidosos em sistemas naturais torna-se extremamente importante para se entender a dinâmica completa desses sistemas. Uma hipótese possível, por exemplo, poderia ser levantada considerando esses ruídos como uma espécie de pressão

¹Apesar de não podermos extrair o *canal troca-de-bit* do Hamiltoniano de Fröhlich, não é difícil imaginar esse efeito sob qualquer tipo de interação ambiental. Esse deve ser o ruído mais natural e portanto trivial para qualquer sistema aberto.

seletiva que o meio biológico exerceria sobre certas configurações do sistema. Desta maneira, apesar de um processo computacional ser algo artificial e bem definido, ainda assim poderia haver a ponte requerida entre processos físicos (quânticos/computacionais) e processos biológicos. Nesse sentido, o formalismo de Operações Quânticas se torna crucial para a descrição da interação bio-sistema-quântico/ambiente.

Apêndice A

Sistemas Abertos

Sistemas abertos são aqueles que *não estão isolados* do seu meio [37]. Esta falta de isolamento pode gerar trocas de matéria ou de energia entre o sistema principal e o meio ambiente. A troca de energia com o meio altera a energia interna do sistema [21]. A forma mais básica de energia encontrada na natureza é o calor. Calor pode ser descrito como o movimento randômico gerado pela manifestação da energia cinética das partículas, num certo meio¹. Quanto maior o calor, maior a energia cinética das partículas gerando uma maior aleatoriedade na posição dessas partículas, implicando num aumento de desordem. A desordem das partículas num sistema é a propriedade fundamental que relaciona o aumento da energia cinética com o conceito de calor. A função que caracteriza a propriedade de aleatoriedade (ou medida de desordem) num sistema com calor é a entropia. A definição de entropia é dada por [21,22,41]:

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad (\text{A.1})$$

¹Calor também pode ser definido como a transferência de energia de um corpo para outro devido a diferença de temperatura.

onde T é a temperatura do sistema, dQ a quantidade de calor inserido no sistema a um processo reversível². A relação entre a energia interna de um sistema, calor e trabalho é dada pela primeira lei da termodinâmica

$$dU = \delta Q + \delta W, \quad (\text{A.2})$$

onde dU representa a energia interna do sistema, δQ representa a quantidade de calor inserida no sistema e δW a quantidade de trabalho fornecida³. No entanto nem Q nem W são funções de estado do sistema, por isso, δQ e δW , não representam um diferencial de uma função [22,41]. A figura A.1 mostra um modelo de um sistema aberto interagindo com suas vizinhanças. Nessa figura, existe a representação uma fonte de calor que fornece energia ao sistema e um banho térmico que modela a perda de energia.



Figura A.1: Esquematização de um sistema aberto com fonte de calor e banho térmico
(figura modificada de [21], pag. 26)

Sob o ponto de vista de microestados possíveis para as partículas de um sistema, a entropia pode ser definida de acordo com a probabilidade de encontrarmos o sistema num

²Quando não existe nenhum tipo de dissipação de energia para o meio.

³Se o sinal de δW for negativo significa que o sistema realiza algum trabalho no meio.

dado estado [21,22], ou seja,

$$S = k \ln \Omega, \quad (\text{A.3})$$

onde k é a constante de Boltzmann e Ω é a medida da probabilidade de ocorrência de um certo estado termodinâmico. Ou seja, Ω é fornecida a partir da distribuição do número de microestados correspondentes a um dado macroestado.

A característica mais importante em sistemas abertos é a irreversibilidade ou aumento da desordem. Num processo reversível, a variação da entropia do sistema é nula; enquanto num processo irreversível a entropia do universo sempre aumenta ou seja, sua variação é sempre maior que zero [8,21,41]. A natureza sempre favorece o máximo de entropia. No máximo de entropia de um sistema diz-se que o sistema está em equilíbrio termodinâmico [22].

As trocas de energia num sistema aberto implicam na mudança de entropia no tempo que pode ser escrita em duas partes [21] como

$$dS = dS_f + dS_s, \quad (\text{A.4})$$

onde dS_f é a entropia associada ao fluxo de calor entre o sistema e o meio, e dS_s é a entropia produzida dentro do sistema em si. Da segunda lei [12,21,22,41] temos que $dS_s \geq 0$ (com $dS_s = 0$ no equilíbrio termodinâmico). Num sistema aberto a mudança de entropia dS_f , dada pelo fluxo de energia, pode ser positiva (quando o sistema libera energia térmica) e negativa (quando sistema recebe energia do meio). Quando o fluxo é negativo a entropia do sistema aberto pode diminuir. Nesse processo algum ordenamento pode ocorrer; por exemplo, se tivermos $dS_f < 0$ e $|dS_f| > |dS_s|$. Se o sistema aberto possuir um

fluxo negativo de energia térmica suficientemente alto (liberação de calor do sistema para o ambiente), então a aleatoriedade de certos microestados do sistema podem diminuir, implicando na diminuição local da energia interna em relação a energia interna total. Nesse processo alguma organização pode emergir.

Apêndice B

Oscilador Harmônico Quântico

O Hamiltoniano de um oscilador harmônico quântico é dado por [8,11-13,21]:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}\omega^2 m X^2, \quad (\text{B.1})$$

sendo P operador momento, X operador posição, ω frequência e m a massa do sistema.

Entretanto, se definirmos os operadores, aniquilação a e criação a^\dagger , na forma

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(X + \frac{iP}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(X - \frac{iP}{m\omega} \right) \quad (\text{B.2})$$

e, substituindo (B.2) em (B.1), poderemos reescrever o Hamiltoniano (B.1) como [8,11]:

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{B.3})$$

É conveniente introduzir aqui, as propriedades de comutação dos operadores de aniquilação e criação¹[11]:

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} [X, P] + \frac{i}{m\omega} [P, X] \right) = 1, \quad (\text{B.4})$$

¹A relação de comutação entre um operador A e um B é definida por: $[A, B] \equiv AB - BA$ [1,3,5].

onde usou-se o fato de que $[X, P] = i\hbar$, $[X, X] = 0$ e $[P, P] = 0$. Chamando de N o operador $a^\dagger a$, pode-se calcular todos os modos normais de vibração correspondentes a um autoestado $|n\rangle$ de N , isto é: $N|n\rangle = n|n\rangle$. Usando a definição (B.2) e a relação (B.4) deriva-se que

$$[N, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a, \quad (B.5)$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger.$$

Das relações (B.5) verifica-se que:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad e \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (B.6)$$

Dessas relações surgem os nomes “aniquilação” para a e “criação” para a^\dagger , já que esses operadores fazem a transição dos modos normais de vibração do sistema. Usando-se (B.6) pode-se mostrar ainda que

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad (B.7)$$

sendo $|0\rangle$ o estado associado ao primeiro modo de vibração que, por sua vez, demarca o primeiro nível de energia do sistema (*ground state*)². Os níveis de energia do oscilador harmônico então podem ser calculados tomando-se

$$H|n\rangle = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle. \quad (B.8)$$

Portanto,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (B.9)$$

²É comum, em análises que envolvam componentes clássicos - como macromoléculas - negligenciar o estado $|0\rangle$ como *ground state*, simplificando o Hamiltoniano como $H = \hbar\omega a^\dagger a$. Isso é equivalente a uma translação no Hamiltoniano $H = \tilde{H} - \hbar\omega/2$ [11].

A evolução temporal dos autoestados é dada pela equação de Schrödinger [8,11-13]. Assim, tomando-se um estado na base do sistema $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)|n\rangle$, a evolução será:

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-iHt/\hbar)|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n \exp(-in\omega t) |n\rangle. \quad (\text{B.10})$$

Uma questão a ser respondida é em relação a capacidade de um oscilador harmônico quântico realizar computação. No primeiro capítulo, mostrou-se que o formalismo matemático usado na computação quântica é independente do sistema físico usado. De fato, um possível candidato para um computador quântico é o oscilador harmônico. Este é um sistema físico de fácil realização, controle e entendimento [8,13].

Uma forma de se fazer computação seria definindo os auto-estados de energia $|n\rangle$ como os estados lógicos (*qubits*) do computador. A figura B.1 mostra uma molécula de 2,3—dibromotiofenil usada em RMN (Ressonância Magnética Nuclear) para implementação de algoritmos quânticos [42]. Essa implementação foi possível usando 4 (quatro) níveis de energia de um oscilador harmônico no qual esta molécula pode ser aproximada (modelando 2 *qubits*) [8]. Transformações de estados lógicos seriam equivalentes a transformações de níveis de energia ³.

³Uma possível codificação, para 2 *qubits*, seria: $|00\rangle = |0\rangle, |01\rangle = |2\rangle, |10\rangle = |4\rangle, |11\rangle = |6\rangle$.

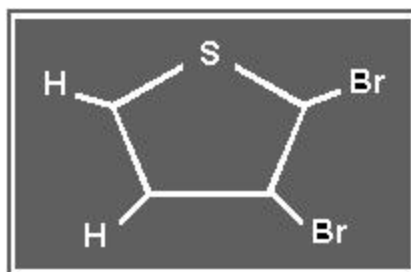


Figura B.1: 2,3—dibromotiofenil: exemplo de um oscilador harmônico
(figura modificada de [8], pag. 342)

Apêndice C

Representação na Esfera de Bloch

A representação na Esfera de Bloch é de extrema importância pois permite uma interpretação geométrica de um estado quântico de dois níveis.

Dado um qubit na forma superposta $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, a partir da conservação da probabilidade podemos resgatar a equação da esfera $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, tal que $|\psi\rangle$ fica [8]:

$$|\psi\rangle = e^{i\lambda} \left(\cos \frac{\phi}{2} |0\rangle + e^{i\theta} \sin \frac{\phi}{2} |1\rangle \right), \quad (\text{C.1})$$

onde λ, ϕ e θ são números reais. É ainda fácil mostrar, pelo produto interno, que o termo $e^{i\lambda}$, chamado de *fase global*, não contribui com nenhuma informação do estado durante um processo de medida [11-13]. Então, efetivamente um estado quântico (de um *qubit*) pode ser escrito como [8]

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\phi}{2} |0\rangle + e^{i\theta} \sin \frac{\phi}{2} |1\rangle. \quad (\text{C.2})$$

Os números ϕ e θ definem um ponto numa esfera de raio um. Essa esfera é conhecida como

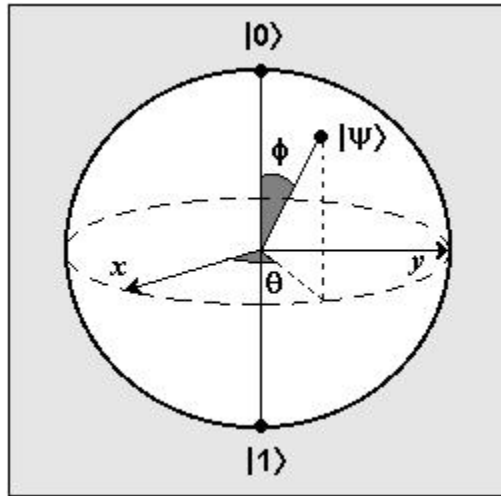


Figura C.1: Esfera de Bloch
(figura modificada de [8], pag. 15)

Esfera de Bloch e está representada na C.1 [8,29].

Nesse esquema, θ representa a fase relativa da base computacional $|0\rangle, |1\rangle$. Utilizando a representação em matrizes densidades, podemos generalizar a descrição geométrica para estados mistos (e puros). Escrevendo o operador densidade de um qubit na forma [8,13]:

$$\rho = \frac{I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}}{2} \quad (\text{C.3})$$

onde \vec{r} é um vetor real tridimensional tal que $\|\vec{r}\| \leq 1$ e é chamado de *vetor de Bloch* para o estado ρ . E $\vec{\sigma}$ é o vetor que contém as matrizes de Pauli em cada direção. Dessa representação vemos que quando o vetor \vec{r} é nulo, isto é $\rho = I/2$, o estado ρ atinge o máximo de impureza (ou mistura) e ρ será puro quando $\|\vec{r}\| = 1$.

Apêndice D

Cálculo de $g(m, j)$

Simplificando a notação, o cálculo do coeficiente $g(m, j)$ é iniciado pela relação

$$(b + b^\dagger)^m |0\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} g(m, j) |j\rangle, \quad (\text{D.1})$$

onde $|0\rangle$ representa o *ground state* do sistema e N o tamanho do espaço. Essa relação de recorrência aparece devido a não-comutatividade entre b e b^\dagger , isto é $[b, b^\dagger] = 1$. Como cada sistema possui dimensão finita, valem os limites de atuação dos operadores:

$$b|j\rangle = \begin{cases} |j-1\rangle & , \text{ se } j > 0 \\ 0 & , \text{ se } j \leq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad b^\dagger|j\rangle = \begin{cases} |j+1\rangle & , \text{ se } j < N-1 \\ 0 & , \text{ se } j \geq N-1 \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

Aplicando indutivamente (D.1), teremos:

$$\begin{aligned} (b + b^\dagger)^{m+1} |0\rangle &= (b + b^\dagger) \left(\sum_{j=0}^{N-1} g(m, j) |j\rangle \right) \\ &= (b + b^\dagger) \left(g(m, 0) |0\rangle + \sum_{j=1}^{N-2} g(m, j) |j\rangle + g(m, N-1) |N-1\rangle \right) \\ &= g(m, 0) |1\rangle + \sum_{j=1}^{N-2} (g(m, j) |j+1\rangle + g(m, j) |j-1\rangle) + g(m, N-1) |N-2\rangle \\ &= g(m, 0) |1\rangle + \sum_{j=2}^{N-1} g(m, j-1) |j\rangle + \sum_{j=0}^{N-3} g(m, j+1) |j\rangle + g(m, N-1) |N-2\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

De (D.1), tem-se ainda que:

$$(b + b^\dagger)^{m+1}|0\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} g(m+1, j)|j\rangle. \quad (\text{D.4})$$

Logo,

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} g(m+1, j)|j\rangle &= g(m, 0)|0\rangle + (g(m, 0) + g(m, 2))|1\rangle + \\ &+ \sum_{j=2}^{N-3} (g(m, j-1) + g(m, j+1))|j\rangle + \\ &(g(m, N-3) + g(m, N-1))|N-2\rangle + g(m, N-2)|N-1\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Gerando, portanto, as relações de recorrência:

$$\left\{ \begin{array}{l} g(m+1, 0) = g(m, 1) \\ g(m+1, j) = g(m, j-1) + g(m, j+1), \text{ para } 1 \leq j \leq N-2 \text{ ,} \\ g(m+1, N-1) = g(m, N-2) \end{array} \right. \quad (\text{D.6})$$

onde, dos limites (D.2), tiramos as condições iniciais:

$$g(0, 0) = 1, \quad g(1, 0) = 0. \quad (\text{D.7})$$

A expressão principal do sistema (D.6) é uma equação de diferenças em duas variáveis cuja solução pode ser verificada em [44]. Porém, para o sistema particular de dois níveis, ($N = 2$ com $j = 0, 1$), podemos utilizar diretamente (D.6) e (D.7) para calcularmos os coeficientes. Assim, com $N = 2$, (D.1) fica

$$(b + b^\dagger)^m|0\rangle = g(m, 0)|0\rangle + g(m, 1)|1\rangle. \quad (\text{D.8})$$

E o sistema (D.6) se reduz a

$$\begin{cases} g(m+1, 0) = g(m, 1) \\ g(m+1, 1) = g(m, 0) \end{cases} . \quad (\text{D.9})$$

Fazendo $m = 0, 1, \dots, \infty$ e aplicando (D.7) obtém-se que

$$g(m, 0) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } m \text{ par} \\ 0 & , \text{ se } m \text{ ímpar} \end{cases} \quad \text{e} \quad g(m, 1) = \begin{cases} 0 & , \text{ se } m \text{ par} \\ 1 & , \text{ se } m \text{ ímpar} \end{cases} . \quad (\text{D.10})$$

Logo, a aplicação de $(b + b^\dagger)^m$ faz o sistema oscilar entre os níveis $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

Referências Bibliográficas

- [1] Dunne, Paul E., *Computability Theory: Concepts and Applications*. 1st. Ellis Horwood 1991.
- [2] Turing, A. M., “On Computable Numbers, with an application to the Entscheidungsproblem” *Proc. Lond. Math. Soc. Ser.*, v. 2, pp. 230-265 1936.
- [3] Deutsch, David, “Quantum Theory, The Church-Turing Principle and The Universal Quantum Computer”. *Proceedings of the Royal Society of London A* v. 400, pp.97-117 1985.
- [4] Deutsch, David; Barenco, Adriano and Ekert, Artur, “Universality in Quantum Computation”. *arXiv:quant-ph/9505018* v1 1995.
- [5] Deutsch, David; Ekert, Artur and Lupacchini, Rossella, “Machines, Logic and Quantum Physics”, *arXiv:math - HO/9911150* v1 1999.
- [6] Shor, P., “Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithm and Factoring”, *Proc. 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* pp. 124-134 1994.
- [7] Lavor, C.; Manssur, L.R.U. and Portugal, R. “Grover’s Algorithm: Quantum Database Search” *arXiv:quant-ph/0301079* v1 2003.

- [8] Nielsen, Michael A. and Chuang, Isaac, *Quantum Computation and Information*. 2nd Cambridge University Press 2000.
- [9] Feynman, R. P., “Simulating Physics with Computers”, *Intr. F. Theor. Phys.*, v.21 pp.467 1982.
- [10] Deutsch, David, *A Essência da Realidade*. Makron Books, 1997.
- [11] Cohen-Tannoudji, Claude; Diu, Bernard and Laloë, Franck, *Quantum Mechanics* vol. 1. John Wiley & Sons and Hermann, 1977.
- [12] Omnès, Roland, *The Interpretation of Quantum Mechanics*. Princeton Series in Physics 1976.
- [13] Preskill, John, Lecture Notes for Physics 229: *Quantum Information and Computation* 1998. <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229>.
- [14] Williams, Colin P. and Scott H. Clearwater, *Explorations in Quantum Computing*. Springer-Verlag (Telos) 1997.
- [15] Arrighi, Pablo and Patricot, Christophe, “On Quantum Operations as Quantum States”. *arXiv:quant-ph/0307024* v3, 2003.
- [16] Breuer, Heinz-Peter and Petruccione, Francesco, “Concepts and Methods in the Theory of Open Quantum Systems”. *arXiv:quant-ph/0302047* v1 2003.
- [17] Tarasov, Vasily E., “Quantum Computations by Quantum Operations on Mixed States”. *arXiv:quant-ph/0201033*, v1 2002.
- [18] Fröhlich, H., “Long-range coherence and energy storage in biological systems”. *Int. J. of Quantum Chemistry* v.2, pp.641-9, 1968.

- [19] Pokorný, J., “Fröhlich Coherent states: Implications for interactions in Biological System and Information Transfer”. *Neural Network World*, pp. 831-847, 1995.
- [20] Shannon, C. E., In *Advances in Electronics and Electron Physics*, vol 53, pages 85-152. 1980, “A Mathematical Theory of Communication”. *Bell System Tech. J.* v.27, pp. 379-423, 1948.
- [21] Pokorný, Jiri and Wu, Tsu-Ming. *Biophysical Aspects of Coherence and Biological Order*. Springer 1998.
- [22] Reif, F., *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. McGraw-Hill Kogakusha, LTD 1965.
- [23] Grover, L.K., “A fast quantum mechanical algorithm for database search”, *Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC)*, Proc. 28th, pp. 212-219, 1996.
- [24] Pombo Jr., Dinamérico Pereira, *Introdução à Análise Funcional*. Eduff 1999.
- [25] Cattaneo, Gianpiero; Dalla, Maria Luisa Chiara; Giuntini, Roberto and Leoporini, Roberto, “An Unsharp Logic from Quantum Computation”, *arXiv:quant-ph/0201013* v3, 2002.
- [26] Brainerd, Walter S. and Landweber, Lawrence H., *Theory of Computation*. John Wiley & Sons 1974.
- [27] Buscemi, Francesco; D’Ariano, G. Mauro and Sacchi, Massimiliano F. “Physical Realizations of Quantum Operations”. *arXiv:quant-ph/0305180* v2, 2003.
- [28] Aschauer, Haus and Briegel, Hans J., “Quantum Communication and Decoherence”. *arXiv:quant-ph/0208014* v2, 2002.

- [29] Lee, Jae-weon; Kim, Chang Ho and Lee, Eok Kyun “Qubit and Conformal Mapping”. *arXiv:quant-ph/0201014*, v1 2002.
- [30] Saunders, Simon, “Time, Quantum Mechanics, and Decoherence”. *Synthese*, v. 102, pp. 235-66, 1995.
- [31] Zurek, Wojciech H., “Decoherence and the Transition from Quantum to Classical” *Physics Today*, pp. 36-44, october 1991.
- [32] Fröhlich, H., “Coherent Electric Vibrations in Biological Systems and Cancer Problem”. *IEEE Transation, MTT* v. 26, pp. 613-617, 1978.
- [33] Fröhlich, H., “The biological Effects of Microwaves and Related Questions”. *In Advances in Electronics and Electron Physics*, v. 53, pp. 85-152, 1980.
- [34] Wu, T-M. and Austin, S., “Biological Bose Condensation and the time Threshold for Biological Effects”. *Physics Letters*, v. 73, pp. 266-268, 1979.
- [35] Sewell G. L., “Quantum Model of Biological Coherence and Chaos”. *Neural Network World*, v. 5, pp. 725-732, 1995.
- [36] Kandel, Eric R.; Schwarts, James H. and Thomas M., Jessell, *Principles of Neural Science* (Appleton & Lange Norwalk), 3rd edition 1991.
- [37] Breuer, Heinz-Peter and Petruccione, Francesco, “Concepts and Methods in the Theory of Open Quantum Systems”. *arXiv:quant-ph/0302047*, v1 2003.
- [38] Maniscalco, S.; Intravaia, F.; Piilo, J. and Messina, A. “Misbelief and Misunderstandings on the Non-Markovian Dynamics of a Damped Harmonic Oscillator”. *arXiv: quant-ph/0306193*, v3 2003.

- [39] Ahn, Doyeol; Lee, Jinhyoung; Kim, M. S. and S. W. Hwang, “Self-consistent non-Markovian theory of a quantum-state evolution for quantum-information processing”. *Phys. Rev. A*, v. 66, 012302, 2002.
- [40] Wiseman, H. M., “Quantum Theory of continuous feedback”. *Phys. Rev. A*, v. 49, n. 4 1993.
- [41] Tipler, Paul, *Física para Cientistas e Engenheiros v2: Gravitação, Ondas e Termodinâmica*. LTC Livros Técnicos e Científicos SA 1991.
- [42] Sarthour, Roberto S.; Bulnes, Juan D.; Belmonte, Salvador B.; Guimarães, Alberto P. e Oliveira, Ivan S. *Computação Quântica via Ressonância Magnética Nuclear CBPF*, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, MO-001/02.
- [43] <http://pespmc1.vub.ac.be/MST.html>.
- [44] Jordan, Charles, *Calculus of Finite Differences*. Chelsea Publishing Company, New York, N.Y. 3rd 1979