



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
MESTRADO EM FÍSICA

ANÁLOGOS GEOMÉTRICOS E MOLECULARES VIA  
RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

MIGUEL LOURENÇO NETO

Campina Grande – PB  
2009

MIGUEL LOURENÇO NETO

ANÁLOGOS GEOMÉTRICOS E MOLECULARES VIA  
RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Dissertação apresentada em cumprimento aos requisitos necessários para conclusão de curso e obtenção do título de mestre em Física pela Universidade Federal de Campina Grande.

Orientadores: Dr. José Suassuna Filho  
Dr. Francisco de Assis de Brito

Campina Grande – PB  
2009

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

L892a

Lourenço Neto, Miguel.

Análogos geométricos e moleculares via ressonância magnética nuclear / Miguel Lourenço Neto.– Campina Grande, 2009.

69 f.: il. color

Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

Referências.

Orientadores: Prof. Dr. José Suassuna Filho, Prof. Dr. Francisco de Assis de Brito.

1. Geometria Esférica. 2. Ressonância Magnética Nuclear. 3. Computação Quântica. I. Título.

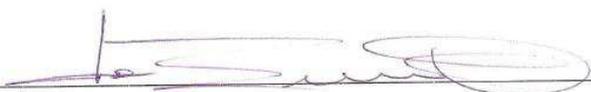
CDU 538.955:538.97(043)

**MIGUEL LOURENÇO NETO**

**ANÁLOGOS GEOMÉTRICOS E MOLECULARES VIA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA**

Dissertação aprovada em 23/03/2009

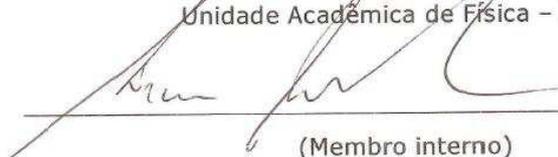
**BANCA EXAMINADORA**



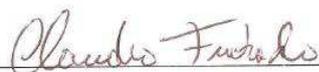
(Presidente)  
Prof. Dr. José Suassuna Filho  
Unidade Acadêmica de Física – UFCG



(Co-Orientador)  
Prof. Dr. Francisco de Assis Brito  
Unidade Acadêmica de Física – UFCG



(Membro interno)  
Prof. Dr. Aécio Ferreira de Lima – UFCG



(Membro externo)  
Prof. Dr. Cláudio Benedito Silva Furtado – UFPB

# Dedicatória

---

*Kāla*

*No meio há tanta resistência  
A inércia tomava conta de mim  
Como um corpo imerso  
em um fluido de baixa densidade  
Só, que com a variação do tempo  
Chegava em mim  
um fluxo maior de energia  
Anulando assim  
O campo de “forças” que me envolvia  
Com o som, veio as colisões efetivas  
o calor, as oscilações...o caos  
Os nossos corpos em  
rotações e translações desordenadas  
Buscavam um momento de equilíbrio  
Até, que em uma frequência caótica  
veio a ressonância  
E ao quadrado da velocidade da luz  
o tempo não vai existir  
Para que estes momentos se conservem  
e nos conduza ao infinito...*

A “menininha” *in memoriam*.

# Agradecimentos

---

Ao *Senhor* que iluminou o meu caminho, quando os dias mais pareciam noites e tudo estava perdido.

A família pelo apoio moral, ético, afetivo, emocional e financeiro, na minha formação enquanto *Ser*.

Em especial aos orientadores José Suassuna Filho e Francisco de Assis de Brito que me ajudaram em épocas distintas de minha vida acadêmica e profissional, e por *acreditarem* em minha proposta de pesquisa para o desenvolvimento desta dissertação.

Aos amigos pela convivência e cumplicidade.

Ao professor Aécio Ferreira de Lima pelos diálogos formais e informais, e pelo apoio incondicional nos momentos de minhas angústias profissionais.

Ao professor Rômulo Rodrigues da Silva pelas dicas (não foram poucas !!!rs) com o MAPLE®.

Ao professor Fábio Leal de Melo Dália por me apresentar um novo mundo, a Relatividade Geral.

Aos “*muitos*” que contribuíram de alguma forma na minha formação acadêmica.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

# Resumo

---

Neste trabalho tratamos da representação de sistemas compostos na mecânica quântica, em especial, a generalização da representação geométrica de um qubit na esfera de Bloch, para  $n$  – *qubits* em uma esfera ao qual chamamos de “*esfera de Bodocongó*”.

Mostramos que a posição de cada qubit (esfera de Bloch) na esfera de Bodocongó, implica em como cada computador quântico (molécula) está configurado, ou seja, a cada novo conjunto de posições, haverá uma configuração diferente para o computador quântico.

Com essa nova representação, será possível “*configurarmos*” os mais diversos sistemas moleculares, computadores quânticos, através da manipulação da posição dos qubits, esferas de Bloch, na esfera de Bodocongó, com a variação do campo magnético estático, e ainda, programar tais computadores através do campo de R.F., responsável pelas operações unitárias de rotação (portas lógicas).

Conseguimos mostrar a relação entre a informação contida em um sistema de spins acoplados com a curvatura do espaço ao qual o espaço de Hilbert projetivo  $\mathbb{C}^2$ , está imerso. Onde vimos que, no caso em que a curvatura é positiva  $\kappa = \frac{1}{R^2}$ , e igual a  $\kappa = 1$ , ou seja para  $R = 1$ , teremos todos os estados de superposição possíveis, enquanto no caso em que  $\kappa = 0$ , ou seja,  $R \rightarrow \infty$ , nem todos os estados superpostos são mais possíveis, surgindo o que denominamos de “*descoerência geométrica*”, evidenciando a relação entre a informação contida no sistema, as esferas de Bloch, com a curvatura do ambiente, a esfera de Bodocongó.

Portanto, o principal resultado deste trabalho é que o modelo proposto foi capaz de representar e configurar um computador quântico, com  $n$  – *qubits* na esfera de Bodocongó, através do campo estático  $\mathbf{B}_0$ , como também programá-lo através do campo oscilante de R.F., via RMN.

# Abstract

---

In this work we treated of the representation of systems composed in the quantum mechanics, especially, the generalization of the geometric representation of a qubit in the sphere of Bloch, for  $n$ -qubits in a sphere to which we called sphere of Bodocongó ".

We showed that the position of each qubit (Bloch sphere) in the Bodocongó sphere, it implicates in as each quantum computer (molecule) it is configured, in other words, to each new group of positions, there will be a different configuration for the quantum computer.

With that new representation, it will be possible we configure the most several molecular systems, quantum computers, through the manipulation of the position of the qubits, Bloch spheres, in the Bodocongó sphere, with the variation of the static magnetic field, and still, to program such computers through the field of R.F., responsible for the unitary operations of rotation (gates logics).

We got to show the relationship among the information contained in a spins system coupled with the curvature of the space to which the Hilbert space projective  $\mathbb{C}^2$ , is submerged. Where did we see that, in the case in what the curvature is positive  $\kappa = \frac{1}{R^2}$ , and equal the  $\kappa = 1$ , or be for  $R = 1$ , will we have all the possible overlap states, while in the case in what  $\kappa = 0$ , in other words,  $R \rightarrow \infty$ , nor are all the states superpostos more possible, did appearing the one what denominate of "*geometric decoherence*", evidencing the relationship among the information contained in the system, the Bloch spheres, with the curvature of the environment, the Bodocongó sphere.

Therefore, the principal result of this work is that the proposed model was capable to represent and to configure a quantum computer, with  $n - qubits$  in the Bodocongó sphere, through the static field  $\mathbf{B}_0$ , as well as to program him/it through the rocking field of R.F., through NMR.

# Sumário

---

1	Capítulo I - Introdução.....	1
2	Capítulo II - Ressonância Magnética Nuclear.....	4
2.1	Fundamentos da espectroscopia RMN.....	4
2.2	Magnetismo Nuclear.....	4
2.3	O deslocamento químico.....	6
2.4	Como observar a Ressonância Magnética Nuclear.....	7
2.5	Efeito Zeeman Nuclear.....	10
2.6	Os métodos da mecânica quântica na análise espectral RMN.....	11
2.7	Hamiltoniano de spin nuclear.....	12
2.8	Funções e valores próprios de $\hat{H}$ .....	13
2.9	Probabilidades de transição e regras de seleção.....	17
2.10	Aplicação ao caso de dois núcleos de $I = \frac{1}{2}$ não acoplados.....	17
2.11	O princípio da incerteza e a largura dos sinais de RMN.....	21
2.12	Computação Quântica via RMN.....	22
3	Capítulo III - Geometria e Informação Quântica.....	24
3.1	A esfera de Bloch.....	24
3.1.2	Propriedades da esfera de Bloch.....	27
3.3	A geometria do espaço euclideano.....	27
3.4	Geometria esférica - A esfera $\mathbb{S}^2$ no $\mathbb{R}^3$ .....	29
3.5	A reparametrização da esfera de Bloch.....	31
3.6	A esfera de Bodocongó - Um modelo para vários qubits.....	37
3.6.1	Propriedades da esfera de Bodocongó.....	37

<b>4</b>	<b>Capítulo IV - Aplicações da esfera de Bodocongó...</b>	<b>42</b>
4.1	Sistemas compostos.....	42
4.2	Triangulação.....	43
4.3	Configurando um computador quântico.....	45
4.4	O modelo para configurações teóricas de três qubits.....	45
4.4.1	Triângulo equilátero esférico $\frac{\pi}{2}$ .....	45
4.4.2	Linear I.....	47
4.4.3	Linear II.....	48
4.5	Os fulerenos.....	50
4.5.1	O modelo para o fullereno.....	54
4.6	Algoritmo de Shor.....	54
4.6.1	O modelo para Shor.....	56
4.7	<i>“Descoerência geométrica”</i> – Análise da curvatura.....	57
<b>5</b>	<b>Capítulo V - Conclusões e Perspectivas.....</b>	<b>60</b>
<b>6</b>	<b>Apêndice I - Teorema de Gauss-Bonnet.....</b>	<b>62</b>
6.1	Forma local do teorema de Gauss-Bonnet.....	62
6.2	Forma global do teorema de Gauss-Bonnet.....	62
6.3	Aplicação do teorema de Gauss-Bonnet.....	64
<b>7</b>	<b>Referências.....</b>	<b>70</b>

# Capítulo I

## 1 Introdução

---

Desde que Richard Feynman *profetizou* o surgimento da computação quântica, não houve muitos avanços na área até 1994. Foi quando surgiu o exemplo mais famoso de um algoritmo quântico, formulado por Peter W. Shor, dos laboratórios Bell [1], para determinar rapidamente os fatores primos de um número inteiro, usando um computador quântico. Para fatorar grandes números em um computador clássico, os melhores algoritmos até então conhecidos, exigem recursos que crescem exponencialmente, com o tamanho do número. Por exemplo, um número com 500 dígitos exige 100 milhões de vezes mais passos de processamento computacional do que um número de 250 dígitos. O custo de processamento do algoritmo de Shor cresce polinomialmente, ou seja, um número de 500 dígitos exige apenas oito vezes mais passos que um número de 250 dígitos [2, 3].

A motivação deste trabalho reside na generalização da representação geométrica de um qubit na esfera de Bloch, para  $n$  – *qubits* em uma esfera ao qual chamamos de “esfera de Bodocongó”.

Com essa nova representação, será possível configurarmos os mais diversos sistemas moleculares, computadores quânticos, através da manipulação da posição dos qubits, esferas de Bloch, na esfera de Bodocongó, com a variação do campo magnético estático, e ainda, programar tais computadores através do campo de R.F., responsável pelas operações unitárias de rotação (portas lógicas).

A esfera como há conhecemos no espaço  $\mathbb{R}^3$  é uma superfície importante em função de suas aplicações a problemas de física.

A esfera no espaço  $\mathbb{R}^3$  é um objeto matemático parametrizado por duas coordenadas  $(\theta, \varphi)$ . Existem outros tipos de esferas, cada uma definida em seu respectivo espaço  $n$  – *dimensional*,  $\mathbb{R}^n$  [4]. O primeiro deles é a esfera na reta unidimensional (fig. I.1), *o ponto*:

$$\mathbb{S}^0 = \{x \text{ em } \mathbb{R} : x^2 = 1, x = \pm 1 \}$$

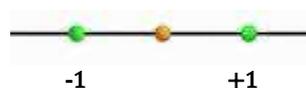


Fig. I.1 – Esfera unidimensional.

Em seguida, a esfera

$$\mathbb{S}^1 = \{(x, y) \text{ em } \mathbb{R}^2: x^2 + y^2 = 1\}$$



Fig. I.2 - Esfera bidimensional.

que é conhecida como uma *circunferência unitária* (fig. I.2), centrada na origem do plano cartesiano.

A esfera unitária (fig. I.3), no espaço  $\mathbb{R}^3$  é o conjunto de todos os pontos do espaço que estão localizados a uma mesma distância de um ponto fixo na origem do espaço cartesiano [5].

$$\mathbb{S}^2 = \{(x, y, z) \text{ em } \mathbb{R}^3: x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$$



Fig. I.3 - Esfera tridimensional.

Uma esfera unitária centrada na origem do espaço  $\mathbb{R}^4$  é dada por

$$\mathbb{S}^3 = \{(x, y, z, w) \text{ em } \mathbb{R}^4: x^2 + y^2 + z^2 + w^2 = 1\}$$

onde perdemos a forma de visualização geométrica.

No capítulo II mostraremos os fundamentos da técnica de espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN), com conceitos básicos, como os de frequência de ressonância ( $\nu_i$ ), desvio químico ( $\delta_i$ ), acoplamento escalar ( $J_{ij}$ ), interação Zeeman, pulsos de R.F., etc.

A RMN é o método espectroscópico mais poderoso e mais usado para a determinação de estruturas moleculares em matéria condensada, e ainda a única que pode manipular as informações obtidas, através dos pulsos seletivos [6].

Trataremos ainda dos métodos da mecânica quântica na análise espectral RMN, através dos níveis de energia, com as respectivas regras de seleção.

Finalmente, faremos uma breve introdução a computação quântica via RMN, e a criação de portas de fase geométrica.

No capítulo III, veremos que operações com um único qubit ( $spin \frac{1}{2}$ ) na presença de um campo magnético  $\mathbf{B}_0$ , são representadas na esfera de Bloch, através de operadores unitários de rotação. Em seguida, generalizaremos esta representação para  $n$  qubits, onde chegaremos ao que vamos denominar de “*esfera de Bodocongó*”, assim poderemos representar um sistema com interação de vários qubits com suas respectivas operações.

No capítulo IV trataremos das aplicações do modelo, para a representação de muitos qubits, que chamamos de esfera de Bodocongó. Testaremos o modelo com dois casos experimentais, a molécula usada para a implementação do algoritmo de Shor, com sete qubits e um teste com o uso do fulereno  $C_{60}$ , e de outros três casos ideais, com configurações hipotéticas.

Finalmente no capítulo V apresentaremos nossas conclusões e perspectivas.

## Capítulo II

# 2 Ressonância Magnética Nuclear

---

A *ressonância magnética nuclear* (RMN) é o método espectroscópico mais poderoso e mais usado para a determinação de estruturas moleculares em *matéria condensada*, e ainda, a única que pode manipular as informações obtidas, através de pulsos seletivos, e faz uso do conceito clássico de ressonância [6].

A ressonância é um dos fenômenos mais estudados pela física, pois se faz presente em quase todos os sistemas mecânicos, ópticos, acústicos, elétricos e magnéticos. E ocorre sempre que estímulos cuja frequência é próxima das vibrações naturais do sistema físico.

Podemos ainda, fazer uma analogia entre o movimento de um núcleo, que possui momento magnético, em um campo magnético, e o movimento de um pião, no campo gravitacional. As forças magnéticas produzidas por um campo magnético fazem com que o núcleo realize um movimento de precessão, da mesma forma que o campo gravitacional faz com que um pião precessiona.

---

## 2.1 Fundamentos da espectroscopia RMN

A técnica de ressonância magnética nuclear fundamenta-se na absorção seletiva de ondas de rádio por amostras, colocadas num campo magnético. A amostra assim excitada regressa ao estado inicial, emitindo energia radiante no domínio das radiofrequências. A determinação precisa dos valores dessas radiofrequências específicas emitidas, e da velocidade com que a amostra regressa ao estado de partida, constituem a essência da informação obtida por RMN. É possível saber tanto sobre a estrutura molecular da amostra como sobre a dinâmica interna e global das respectivas moléculas [7].

## 2.2 Magnetismo Nuclear

Como o próprio nome sugere, só são moléculas “ativas” para RMN as que possuem núcleos magnéticos. Em particular núcleos de hidrogênio,  $^1\text{H}$ , são magnéticos, e assim, são sondas magnéticas preferenciais para a obtenção da informação sobre a molécula em que se integram. Núcleos magnéticos de menor abundância natural, como o carbono-13 (abundância natural de cerca de 1%), têm

constituído nos últimos anos uma sonda magnética extremamente poderosa em estudos de RMN.

A RMN deteta a resposta dos núcleos atômicos aos campos magnéticos. Quando estes núcleos magnéticos interagem com os campos magnéticos externos, mensuráveis sinais podem ser produzidos.

Medições de RMN podem, a princípio ser feitas em qualquer núcleo que tenha um número ímpar de prótons e nêutrons, ou ambos, como o núcleo de hidrogênio ( $^1H$ ), carbono ( $^{13}C$ ), e de sódio ( $^{23}Na$ ) [8].

Para a maioria dos núcleos encontrados, o sinal de RMN induzido por campos magnéticos externos é pequeno demais para ser detectado. No entanto, o hidrogênio, que tem apenas um próton e nenhum nêutron, é abundante em água e hidrocarbonetos, e possui um momento magnético relativamente grande, produzindo um sinal forte. Átomos de hidrogênio ou núcleos como  $^1H$ ,  $^{13}C$ ,  $^{19}F$  e  $^{31}P$  podem ser considerados como pequenos ímãs, sem orientação preferencial na ausência de um campo magnético, como visto na fig. 1.

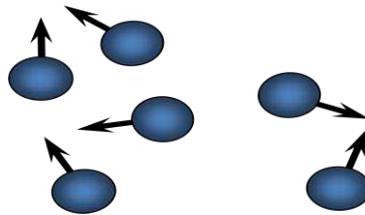


Figura II.1: Orientação ao acaso de átomos na ausência de um campo magnético

Quando aplicamos um campo magnético forte a uma amostra, os spins tendem a se alinharem com as linhas do campo, de modo análogo a uma agulha magnética no campo magnético terrestre, fig.2.

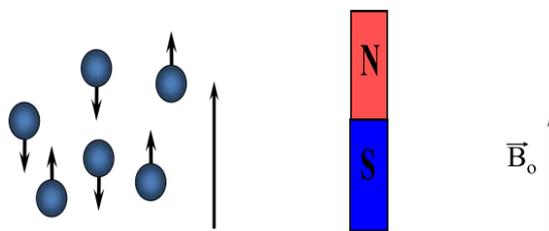


Figura II.2: Alinhamento com o campo magnético

Para alterarmos essa orientação, exige-se energia, já que se trata de momentos magnéticos muito pequenos, tal energia requerida será pequena. Como o momento magnético é diferente conforme a espécie nuclear, a energia necessária a essa

perturbação da orientação varia de núcleo para núcleo; assim, é quase a mesma para  $^1\text{H}$  e  $^{19}\text{F}$ , mas significativamente inferior para  $^{31}\text{P}$  e  $^{13}\text{C}$ . Isto permite utilizar cada um destes núcleos, individualmente, como sondas magnéticas.

No entanto, o alinhamento com o campo não é perfeito, resultando em uma precessão, onde os eixos giram em torno das linhas do campo, a uma frequência específica, para cada tipo de núcleo e grupo químico presente numa molécula, à qual está associada uma distribuição eletrônica e por sua vez uma blindagem magnética [9].

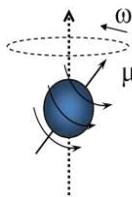


Figura II.3: Precessão de um núcleo em torno das linhas do campo

Para caracterizar tal movimento, devemos medir o ciclo de precessão, ou seja, quantas vezes por segundo é formada a figura do *cone*, obtendo assim, a frequência ( $\nu$ ) do movimento de precessão.

Esta frequência é diretamente proporcional à intensidade do campo magnético  $B_0$ , e é denominada *frequência de Larmor*  $\omega_L$ , e a constante de razão giromagnética  $\gamma$ , eq.(II. 1), cujo valor é diferente não só para cada elemento, como também para cada isótopo do mesmo elemento, ou ainda, para cada espécie nuclear

$$\nu_L = \frac{\gamma B_{loc}}{2\pi} \quad (\text{II. 1})$$

## 2.3 O deslocamento químico

Conforme acabamos de ver os momentos magnéticos nucleares interagem com o *campo magnético local*. Este campo geralmente é diferente do campo aplicado, pois o campo externo induz momentos angulares orbitais dos elétrons, que adicionam um pequeno campo magnético  $\delta B$  no núcleo. Este novo campo é proporcional ao campo aplicado,

$$\delta B = -\sigma B_0 \quad (\text{II. 2})$$

onde a grandeza adimensional  $\sigma$  é a *constante de blindagem do núcleo*. Núcleos que estejam em grupos químicos diferentes têm constantes de blindagem diferentes. O cálculo de valores confiáveis de blindagem nuclear e molecular é

demasiadamente complicado, mas as tendências de suas variações são bastante compreendidas.

Uma vez que o campo local é dado por,

$$B_{loc} = B_0 + \delta B = (1 - \sigma)B_0 \quad (\text{II. 3})$$

com isso, teremos para a frequência de Larmor,

$$\nu_L = \frac{\gamma B_{loc}}{2\pi} = (1 - \sigma) \frac{\gamma B_0}{2\pi} \quad (\text{II. 4})$$

Esta frequência irá variar conforme a mudança do *ambiente* em que o núcleo se encontra. Implicando assim que, núcleos diferentes, embora do mesmo elemento, entram em ressonância em frequências diferentes.

Exprimem-se ainda, as frequências de ressonância em termos de uma grandeza empírica, o *deslocamento químico*,

$$\delta = \frac{(\nu - \nu_0)10^6}{\nu_0} \quad (\text{II. 5})$$

que se relaciona com a diferença entre a frequência de ressonância,  $\nu$  do núcleo e a de um padrão de referência,  $\nu_0$ .

A relação entre o deslocamento químico  $\delta$ , e a constante de blindagem  $\sigma$ , será

$$\delta = \frac{[(1 - \sigma)B_0 - (1 - \sigma_0)B_0]10^6}{(1 - \sigma_0)B_0} = \frac{(\sigma_0 - \sigma)10^6}{(1 - \sigma_0)} \approx (\sigma_0 - \sigma)10^6 \quad (\text{II. 6})$$

Logo, quando a constante de blindagem,  $\sigma$ , diminui ,aumenta o deslocamento químico  $\delta$  [10].

## 2.4 Como observar a Ressonância Magnética Nuclear

Ao colocarmos uma amostra sob o efeito de um campo magnético, uma pequena fração dos núcleos nela contidos vence a agitação térmica e se orienta preferencialmente ao longo do campo estático  $B_0$ , criando uma magnetização, paralela a este campo. Na direção perpendicular não há qualquer magnetização macroscópica, já que os movimentos de precessão dos núcleos individuais são, em geral, independentes e não correlacionados; por isso, as diferentes projeções dos seus momentos magnéticos apontam uniformemente para todas as direções do plano. Essa situação descreve o equilíbrio termodinâmico do sistema.

Para removermos a condição de equilíbrio do sistema magnetizado, aplicamos, sob a forma de pulsos, um segundo campo magnético oscilante no plano

perpendicular. A orientação desse novo campo deve mudar com uma frequência igual à de Larmor  $\omega_L$ . Para a maioria dos núcleos, a frequência de Larmor  $\omega_L$  fica na faixa da radiofrequência (*RF*), indo de alguns MHz até frações de GHz (metais de transição), sendo que em alguns sistemas a ressonância pode ocorrer em 10 GHz (terras raras pesadas).

Uma forma de obtermos o campo magnético oscilante nessa frequência, pode ser obtida colocando-se a amostra dentro de uma bobina de radiofrequência. Desta maneira o gerador de radiofrequência poderá induzir na bobina, o campo de frequência natural do sistema, ou seja, da “amostra”[6].

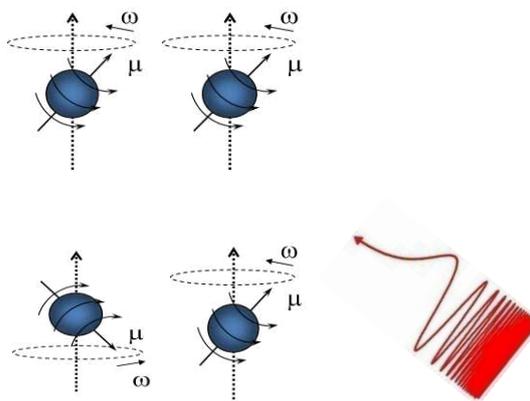


Figura II.4: Pulso de radiofrequência absorvida pela amostra

Terminada a ação do pulso, a magnetização formará, com a direção de  $B_0$ , um ângulo que dependerá da intensidade e do tempo de aplicação do pulso. Para descrever o efeito de tais pulsos sobre a magnetização, devemos aplicar *pulsos*  $\pi/2$  e *pulsos*  $\pi$ , pois eles provocam respectivamente, rotações de  $90^\circ$  e de  $180^\circ$  nos núcleos individuais [7].

Após a aplicação do *pulso*  $\pi/2$ , o sistema encontra-se em uma situação de não-equilíbrio. A magnetização, que antes estava orientada preferencialmente ao longo do campo, agora está perpendicular a este campo e, por esse motivo, é denominada de magnetização transversal.

A magnetização transversal decresce exponencialmente à medida que o tempo passa, e isto faz com que a amplitude do sinal por ela induzida, decaia a zero da mesma forma. O sinal resultante recebe o nome de *decaimento livre de indução*, ou *FID*, do inglês “*free induction decay*”. Nos sólidos magnéticos, esse tempo de relaxação é da ordem de algumas centenas de microssegundos, enquanto em líquidos é da ordem de milissegundos a poucos segundos

A mesma bobina utilizada para estabelecer o campo oscilante servirá agora para detectar os sinais de RMN.

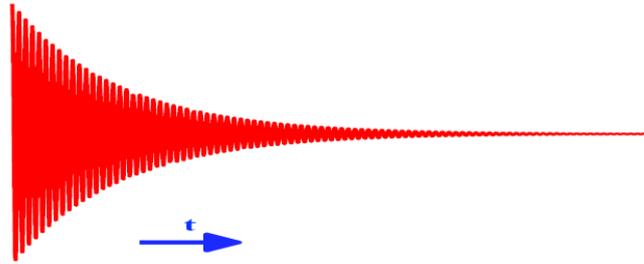


Figura II.5: Decaimento Livre de Indução

A absorção produz uma inversão de polaridade, e todos os núcleos que interagem da mesma forma com o pulso de RF absorvem sua energia e sofrem inversão de polaridade. A bobina capta o sinal produzido pela variação da magnetização originada pelas mudanças na precessão dos spins e o envia a um *detector/computador* [11].

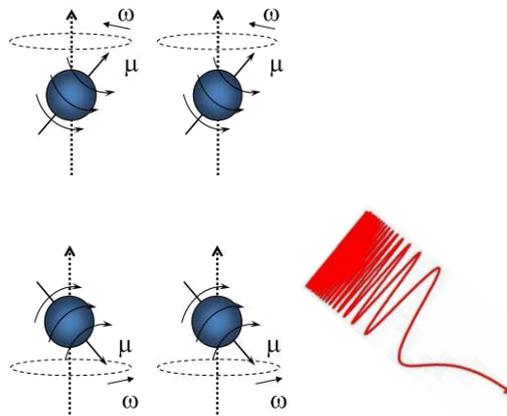


Figura II.6: Energia que foi absorvida, agora liberada pela amostra

Em intervalos aleatórios, os spins têm sua polaridade reinvertida, liberando a energia de RF antes absorvida e retornando às suas polaridades originais.

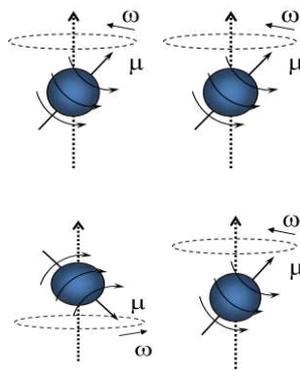


Figura II.7: Condição original de polaridade

## 2.5 Efeito Zeeman Nuclear

Segundo as regras da mecânica quântica, a energia de qualquer sistema *microscópico*, não pode ser qualquer, ou seja, ela é quantizada, isto é, só determinados níveis de energia são possíveis. Para um núcleo  $^1\text{H}$ , por exemplo, só dois níveis de energia magnética são possíveis. O de menor energia corresponde à orientação preferida pelo  $^1\text{H}$ , e o de maior energia corresponde a uma orientação oposta.

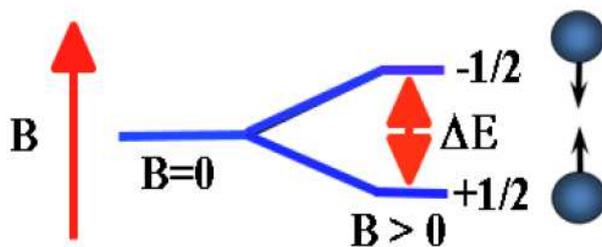


Figura II.8: Níveis de energia do spin num campo magnético

A diferença  $\Delta E$  é vencida com absorção de um *pulso de R.F.* de apropriada energia.

Certamente, quanto maior for a intensidade do campo aplicado  $B$  mais estável é a situação  $\alpha$  e mais instável o estado  $\beta$ ,  $\Delta E$  aumenta ao se aumentar a intensidade de  $B$ .

Assim, o que torna o fenômeno de RMN relevante, é o fato de núcleos da mesma espécie, mas em situações diferentes na molécula (distribuição eletrônica dos grupos) absorverem/reemitirem energias *R.F.* diferentes. Isso se deve ao campo de contribuição dos elétrons da molécula para o campo magnético total “sentido” pelo núcleo magnético, como vimos antes. Por exemplo, o ambiente eletrônico em torno dos núcleos  $^1\text{H}$  do grupo  $\text{CH}_3$  é diferente do grupo  $\text{CH}_2$  ou do grupo  $\text{OH}$ , os núcleos  $^1\text{H}$  em cada um destes grupos experimentam um campo magnético total ligeiramente diferente. Em consequência disso, absorvem radiações *R.F.* de frequências ligeiramente diferentes. Por outro lado, havendo três vezes mais núcleos  $^1\text{H}$  em  $\text{CH}_3$  do que em  $\text{OH}$ , e duas vezes em  $\text{CH}_2$ , as intensidades das radiações absorvidas surgem na relação  $1:2:3$  respectivamente para  $\text{OH}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$ .

Esta simples relação entre o número de grupos diferentes de átomos H numa molécula e o número de sinais no espectro RMN e, simultaneamente, a possibilidade de estabelecer diretamente o número de átomos H em cada grupo pela intensidade relativa dos sinais de RMN, tornaram a espectroscopia de RMN uma técnica útil e poderosa na identificação de substâncias químicas.

Como é tradicional em outros tipos de espectroscopia, a frequência nos espectros de RMN aumenta da direita para a esquerda. As posições dos sinais podem ser medidas em *Hz* em relação a um sinal de referência (*tetrametilsilano*  $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ ,

*TMS*, por exemplo, adicionando uma pequena quantidade à amostra), e em partes por milhão, *PPM*, unidades  $\delta$  de desvio químico.

A intensidade de cada sinal é a respectiva área do espectro, sendo dada normalmente nos espectros por uma linha em degrau correspondente à integração de cada banda de absorção: a altura de cada degrau é proporcional à área do sinal [10, 12, 13].

Uma analogia com o campo gravitacional, é a de uma pessoa que só pudesse assumir posições verticais: de pé ou “*de ponta-cabeça*”. A primeira é mais estável que a segunda. Porém, em um “ambiente” de menor gravidade como a Lua, a diferença de energia entre as duas orientações é menor do que na Terra onde o campo  $G$  é mais intenso (fig.8) [14].

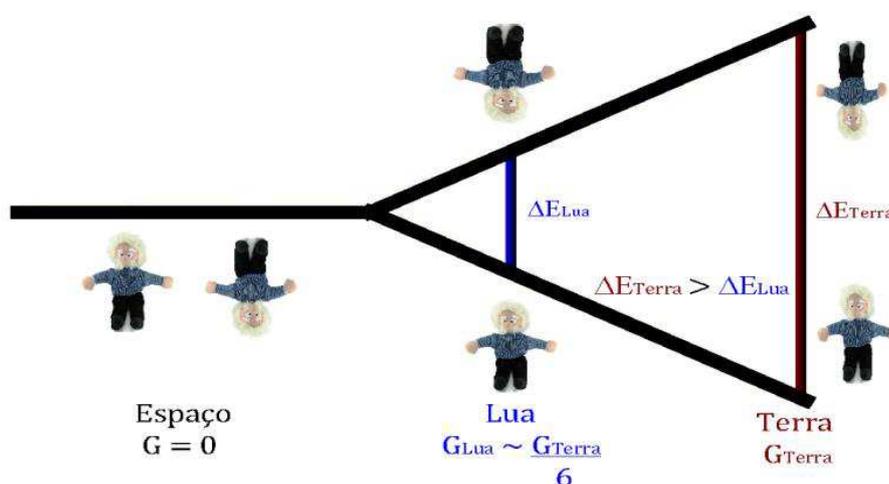


Figura II.9: Efeito Zeeman Gravitacional

## 2.6 Os métodos da mecânica quântica na análise espectral RMN

Os passos na aplicação da mecânica quântica em análise espectral RMN são os seguintes:

- i) Estabelecer a forma do hamiltoniano de spin nuclear,  $\hat{\mathcal{H}}$ , apropriado ao sistema;
- ii) Calcular quais as suas funções próprias  $\Psi_n$  e valores próprios (energias)  $E_n$ :

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (\text{II. 7})$$

isto é, determinar os estados estacionários do sistema de spin;

- iii) Calcular as probabilidades de transição entre estados, estabelecendo também as apropriadas “regras de seleção” [15].

## 2.7 Hamiltoniano de spin nuclear

O hamiltoniano para o conjunto de spins nucleares de uma molécula sujeita a um campo magnético  $B_0$  é formado fenomenologicamente a partir da expressão clássica da energia magnética nuclear. A energia magnética nuclear total de uma molécula pode ser expressa por,

$$E = \sum_i E_i + \sum_{i<j} E_{ij} \quad (\text{II. 8})$$

em que  $E_i$  é a energia magnética de cada núcleo  $i$ , excluído o efeito da interação com outros núcleos, e  $E_{ij}$  é a energia de interação ou acoplamento dos spins  $i$  e  $j$ . Contribuições de mais de dois spins simultaneamente (por exemplo,  $E_{ijk}$ ) para a energia de interação são desprezadas.

No caso de sólidos, a interação entre moléculas também contribui para  $E$ . Num fluido isotrópico, porém, devido às múltiplas orientações relativas que as moléculas assumem, os termos que delas dependem tendem para zero e a equação (II. 8) mantém-se válida.

Classicamente,  $E$  exprimi-se por

$$E_i = -\mu_{iz}\mathbf{B}_i = -\gamma_i a_{iz}\mathbf{B}_i \quad (\text{II. 9})$$

onde  $\mu_{iz}$  e  $a_{iz}$  são as componentes  $z$ , respectivamente do momento magnético e do momento angular do núcleo  $i$ ,  $\gamma_i$  é a correspondente razão giromagnética e  $\mathbf{B}_i = B_0(1 - \sigma_i)$  é o campo magnético no local de  $i$ , já corrigido pela constante de proteção magnética  $\sigma$  desse núcleo ( $B_0$  define a direção  $z$  e  $\sigma_i$  é o valor médio do tensor  $\tilde{\sigma}$ ) [10]. Exprimindo o momento angular de spin  $\mathbf{a}$  em termos de  $\mathbf{I}$  (momento angular em unidades  $\frac{h}{2\pi}$ ),  $\mathbf{a} = \frac{h\mathbf{I}}{2\pi}$ , e atendendo à relação de ressonância  $\nu_i = \frac{\gamma B_i}{2\pi}$ , pode-se escrever-se  $E_i$ , na forma seguinte

$$E_i = -\frac{\gamma_i h}{2\pi} \mathbf{B}_i \mathbf{I}_{iz} = -h\nu_i \mathbf{I}_{iz} \quad (\text{II. 10})$$

Entretanto,  $E_{ij}$ , que é proporcional à interação  $\mathbf{I}_i \mathbf{I}_j$  dos momentos angulares de spin  $i$  e  $j$ , exprimi-se por

$$E_{ij} = hJ_{ij} \mathbf{I}_i \mathbf{I}_j \quad (\text{II. 11})$$

sendo  $J_{ij}$  a constante de acoplamento (em Hz) dos núcleos  $i$  e  $j$ .

Então, o hamiltoniano correspondente às contribuições (II. 10) ( $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ ) e (II. 11) ( $\hat{\mathcal{H}}^{(1)}$ ) é

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \hat{\mathcal{H}}^{(0)} + \hat{\mathcal{H}}^{(1)} \\ \hat{\mathcal{H}} &= - \sum_i h\nu_i \hat{\mathbf{I}}_{iz} + \sum_{i<j} hJ_{ij} \hat{\mathbf{I}}_i \hat{\mathbf{I}}_j\end{aligned}\quad (\text{II. 12})$$

ou, em unidades de frequência e não de energia (dividir por  $h$ ):

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_i \nu_i \hat{\mathbf{I}}_{iz} + \sum_{i<j} J_{ij} \hat{\mathbf{I}}_i \hat{\mathbf{I}}_j \quad (\text{II. 13})$$

## 2.8 Funções e valores próprios de $\hat{\mathcal{H}}$

Para um núcleo de  $I = \frac{1}{2}$ , as funções de  $I_z$  e, portanto, de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ , são  $\alpha$  e  $\beta$ . Estas funções são tomadas como normalizadas e ortogonais; isto é, utilizando a notação de Dirac,

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \equiv \int \alpha \alpha \, d\tau = \int \beta \beta \, d\tau \equiv \langle \beta | \beta \rangle = 1 \quad (\text{II. 14})$$

$$\langle \alpha | \beta \rangle \equiv \int \alpha \beta \, d\tau = 0 \quad (\text{II. 15})$$

Estas condições exprimem a situação de que um spin individual existe ou em estado  $\alpha$  ou em estado  $\beta$  (por isso, (II. 15)) e com probabilidade total em cada estado que é 1 (por isso, (II. 14)).

Os valores próprios de  $\hat{\mathbf{I}}_z$  com as funções  $\alpha$  e  $\beta$  são, respectivamente,  $m = \frac{1}{2}$  e  $m = -\frac{1}{2}$ :

$$\hat{\mathbf{I}}_z \alpha = \frac{1}{2} \alpha \quad (\text{II. 16})$$

$$\hat{\mathbf{I}}_z \beta = -\frac{1}{2} \beta \quad (\text{II. 17})$$

e os de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ ,  $E_\alpha$  e  $E_\beta$ , dados por

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} \alpha = -\nu \hat{\mathbf{I}}_z \alpha = -\frac{\nu}{2} \alpha \quad (\text{II. 18})$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} \beta = -\nu \hat{\mathbf{I}}_z \beta = \frac{\nu}{2} \beta \quad (\text{II. 19})$$

A diferença  $\Delta_E = E_\beta - E_\alpha$  (em unidades de frequência) é  $\Delta_E = \frac{\nu}{2} - \left(-\frac{\nu}{2}\right) = \nu$ , a frequência de ressonância [16].

Devemos notar que as funções  $\alpha$  e  $\beta$  não são funções próprias dos operadores  $\hat{\mathbf{I}}_x$  e  $\hat{\mathbf{I}}_y$ . Na verdade, em conformidade com a teoria geral dos momentos angulares em mecânica quântica, a operação de qualquer daqueles operadores sobre  $\alpha$  ou  $\beta$  não reproduz a mesma função, multiplicada por um fator numérico, mas

$$\hat{\mathbf{I}}_x \alpha = \frac{1}{2} \beta \quad (\text{II. 20})$$

$$\hat{\mathbf{I}}_y \alpha = \frac{i}{2} \beta \quad (\text{II. 21})$$

$$\hat{\mathbf{I}}_x \beta = \frac{1}{2} \alpha \quad (\text{II. 22})$$

$$\hat{\mathbf{I}}_y \beta = -\frac{i}{2} \alpha \quad (\text{II. 23})$$

Assim sendo, enquanto, por exemplo, o valor esperado de  $\hat{\mathbf{I}}_z$  com a função  $\alpha$  é

$$\langle \alpha | \hat{\mathbf{I}}_z | \alpha \rangle = \frac{1}{2} \langle \alpha | \alpha \rangle = \frac{1}{2} \quad (\text{II. 24})$$

o de  $\hat{\mathbf{I}}_x$  é

$$\langle \alpha | \hat{\mathbf{I}}_x | \alpha \rangle = \frac{1}{2} \langle \alpha | \beta \rangle = 0 \quad (\text{II. 25})$$

Entretanto, por exemplo,

$$\langle \alpha | \hat{\mathbf{I}}_x | \beta \rangle = \frac{1}{2} \langle \alpha | \alpha \rangle = \frac{1}{2} \quad (\text{II. 26})$$

$$\langle \beta | \hat{\mathbf{I}}_y | \alpha \rangle = \frac{i}{2} \langle \beta | \beta \rangle = \frac{i}{2} \quad (\text{II. 27})$$

Estes integrais constituem alguns dos elementos das chamadas matrizes de Pauli

$$\hat{\mathbf{I}}_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II. 28})$$

$$\hat{\mathbf{I}}_y = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II. 29})$$

$$\hat{\mathbf{I}}_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{II. 30})$$

Em vista da forma de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ , (II. 12), para qualquer sistema de spins sempre as funções próprias de

$$\hat{F}_z = \sum_i \hat{\mathbf{I}}_{iz} \quad (\text{II. 31})$$

são funções próprias de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ .

As funções  $\Psi$  correspondentes aos vários estados estacionários deverão ser normalizadas e ortogonais,

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = 1 \quad (\text{II. 32})$$

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = 0; \quad m \neq n \quad (\text{II. 33})$$

além de satisfazerem à condição de autovalores,

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \quad (\text{II. 34})$$

Assim,

$$\langle \Psi_n | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_n \rangle = E_n \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = E_n \quad (\text{II. 35})$$

$$\langle \Psi_m | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_n \rangle = E_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = 0 \quad (\text{II. 36})$$

Em outras palavras, a matriz quadrática e simétrica constituída por elementos,

$$\mathcal{H}_{mn} = \langle \Psi_m | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_n \rangle \quad (\text{II. 37})$$

é diagonal

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H}_{11} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{22} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{H}_{n-1\ n-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \mathcal{H}_{nn} \end{bmatrix} \quad (\text{II. 38})$$

com  $\mathcal{H}_{11}=E_1$ ,  $\mathcal{H}_{22}=E_2$ ,  $\mathcal{H}_{33}=E_3$  etc.

No caso de um sistema de dois núcleos de  $I = \frac{1}{2}$ , há 4 estados de spin, já que para um valor  $m$  de um, há 2 possibilidades de spin do outro. Para  $n$  spins, o número de funções e valores próprios de  $\hat{\mathcal{H}}$  é  $2^n$  [16, 17].

Ainda quando  $I = \frac{1}{2}$  e  $n = 4$ , uma das funções é

$$\Psi_1 = \alpha(1)\alpha(2) \quad (\text{II. 39})$$

Correspondente a  $m_t = m_1 + m_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ . Os índices 1 e 2 designam os dois núcleos. Outra é

$$\Psi_4 = \beta(1)\beta(2) \quad (\text{II. 40})$$

correspondente a  $m_t = m_1 + m_2 = -\frac{1}{2} + \left(-\frac{1}{2}\right) = -1$ . As duas restantes supõem um spin  $\alpha$  e outro  $\beta$ , isto é  $m_t = 0$ .

Veja que se escreve  $\Psi_1 = \alpha(1)\alpha(2)$  e não, por exemplo,  $\Psi_1 = \alpha(1) + \alpha(2)$ . Na verdade,  $\alpha(1) + \alpha(2)$  não seria função própria de  $\hat{F}_z = \hat{I}_{1z} + \hat{I}_{2z}$  (como se pode verificar facilmente) nem de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ . Por outro lado, não surpreende que se tenha uma função produto, dado que  $\Psi_1^2$  é uma densidade de probabilidade e a

probabilidade de o spin 1 ser  $\alpha$  e, simultaneamente, o spin 2 ser  $\alpha$  é dada por  $\alpha^2(1)\alpha^2(2)$  e não por  $\alpha^2(1) + \alpha^2(2)$ .

Como veremos mais adiante, embora a função

$$\Psi_1 = \alpha(1)\alpha(2) \dots \alpha(n) \quad (\text{II. 41})$$

e a função

$$\Psi_n = \beta(1)\beta(2) \dots \beta(n) \quad (\text{II. 42})$$

sejam sempre funções próprias de

$$\hat{F}_z = \sum_i \hat{I}_{iz}$$

com  $m_t = \frac{n}{2}$ , de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$  e, até de  $\hat{\mathcal{H}}$  total, as demais funções produto do tipo  $\alpha(1)\alpha(2) \dots \alpha(n)$ , embora funções próprias de  $\hat{F}_z$  e de  $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$  não o são obrigatoriamente de  $\hat{\mathcal{H}}$ . Quando não, então as funções próprias restantes de  $\hat{\mathcal{H}}$  (além de  $\Psi_1$  e de  $\Psi_n$ ) podem exprimir-se em termos dessas funções produtos.

Anote-se que é possível demonstrar que  $\hat{F}_z$  e  $\hat{\mathcal{H}}$  são operadores que comutam, isto é,  $\hat{F}_z\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}\hat{F}_z$ ; por outras palavras, o resultado da operação de  $\hat{F}_z\hat{\mathcal{H}}$  sobre  $\Psi$  é o mesmo que o de  $\hat{\mathcal{H}}\hat{F}_z$  sobre  $\Psi$ . Segundo um teorema fundamental da mecânica quântica, é então, possível encontrar funções  $\Psi_n$  que sejam ao mesmo tempo funções próprias de  $\hat{F}_z$  e de  $\hat{\mathcal{H}}$  [16].

Se a um valor próprio  $m_t$  corresponder apenas uma função própria de  $\hat{F}_z$ , então esta função é também função própria de  $\hat{\mathcal{H}}$ . É o caso das funções  $\Psi_1$  e  $\Psi_n$  acima indicadas e que são as únicas para  $m_t = \frac{n}{2}$  e  $m_t = -\frac{n}{2}$ . Havendo duas ou mais funções próprias de  $\hat{F}_z$  que sejam degeneradas (igual  $m_t$ ), cada uma delas não é obrigatoriamente função própria de  $\hat{\mathcal{H}}$ . Mas, como combinações lineares de funções degeneradas são ainda funções próprias (com o mesmo  $m_t$ ), é possível compor linearmente essas funções (funções produto) de modo a que sejam também funções próprias de  $\hat{\mathcal{H}}$ .

## 2.9 Probabilidades de transição e regras de seleção

Como sabemos, a probabilidade de uma transição entre dois estados de spin nuclear  $\Psi_a$  e  $\Psi_b$  é proporcional ao quadrado do chamado *momento de transição* definido por

$$\text{Momento de transição} = \langle \Psi_b | \sum_i \hat{I}_{ix} | \Psi_a \rangle \quad (\text{II. 43})$$

Tendo em conta, para o caso  $I = \frac{1}{2}$ , a operação de  $\hat{I}_x$  sobre as funções  $\alpha$  ou  $\beta$ , em particular que  $\hat{I}_x$  só tem elementos fora da diagonal na matriz de Pauli respectiva (apenas  $\langle \alpha | \hat{I}_x | \beta \rangle$  ou  $\langle \beta | \hat{I}_x | \alpha \rangle$  não são nulos), então o operador  $\hat{I}_{ix}$  só terá elemento matricial não nulo entre estados  $\Psi_a$  e  $\Psi_b$  desde que estes só difiram no spin do núcleo i. Por exemplo,

$$\begin{aligned} \langle \alpha(1)\alpha(2) | \hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x} | \beta(1)\beta(2) \rangle \\ = \langle \alpha(1) | \hat{I}_{1x} | \beta(1) \rangle \langle \alpha(2) | \beta(2) \rangle + \langle \alpha(1) | \beta(1) \rangle \langle \alpha(2) | \hat{I}_{2x} | \beta(2) \rangle \\ = 0 \end{aligned} \quad (\text{II. 44})$$

Mas

$$\langle \alpha(1)\alpha(2) | \hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x} | \alpha(1)\beta(2) \rangle = \frac{1}{2} \neq 0 \quad (\text{II. 45})$$

Esta verificação pode ser generalizada na seguinte regra de seleção: só são possíveis transições entre estados que difiram de  $\pm 1$  na soma  $m_t$  dos números quânticos individuais m. Como já reconhecemos,  $m_t$  representa os valores próprios do operador

$$\hat{F}_z = \sum_i \hat{I}_{iz}$$

## 2.10 Aplicação ao caso de dois núcleos de $I = \frac{1}{2}$ não acoplados

Neste caso em que os núcleos se comportam de modo inteiramente independentes,  $J_{12} = 0$ , e em que o espectro consta simplesmente de dois picos às frequências de ressonância dos núcleos, todas as funções produto são funções próprias de  $\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ :

$$\Psi_1 = \alpha(1)\alpha(2) \quad m_t = 1 \quad (\text{II. 46. a})$$

$$\Psi_2 = \alpha(1)\beta(2) \quad m_t = 0 \quad (\text{II. 46. b})$$

$$\Psi_3 = \beta(1)\alpha(2) \quad m_t = 0 \quad (\text{II. 46. c})$$

$$\Psi_4 = \beta(1)\beta(2) \quad m_t = -1 \quad (\text{II. 46. d})$$

Então,

$$\begin{aligned}
E_1 &= \langle \Psi_1 | \hat{\mathcal{H}}^{(0)} | \Psi_1 \rangle = \langle \alpha(1)\alpha(2) | -v_1 \hat{\mathbf{I}}_{1z} - v_2 \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \alpha(1)\alpha(2) \rangle \\
&= -v_1 \langle \alpha(1) | \hat{\mathbf{I}}_{1z} | \alpha(1) \rangle \langle \alpha(2) | \alpha(2) \rangle - v_2 \langle \alpha(2) | \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \alpha(2) \rangle \langle \alpha(1) | \alpha(1) \rangle \\
&= -\frac{v_1}{2} - \frac{v_2}{2} = -\frac{(v_1 + v_2)}{2} \tag{II. 47}
\end{aligned}$$

e, de modo semelhante para  $E_2$ ,

$$\begin{aligned}
E_2 &= \langle \Psi_2 | \hat{\mathcal{H}}^{(0)} | \Psi_2 \rangle = \langle \alpha(1)\beta(2) | -v_1 \hat{\mathbf{I}}_{1z} - v_2 \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \alpha(1)\beta(2) \rangle \\
&= -v_1 \langle \alpha(1) | \hat{\mathbf{I}}_{1z} | \alpha(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta(2) \rangle - v_2 \langle \beta(2) | \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \beta(2) \rangle \langle \alpha(1) | \alpha(1) \rangle \\
&= -\frac{v_1}{2} - \frac{v_2}{2} = -\frac{(v_1 - v_2)}{2} \tag{II. 48}
\end{aligned}$$

para  $E_3$ ,

$$\begin{aligned}
E_3 &= \langle \Psi_3 | \hat{\mathcal{H}}^{(0)} | \Psi_3 \rangle = \langle \beta(1)\alpha(2) | -v_1 \hat{\mathbf{I}}_{1z} - v_2 \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \beta(1)\alpha(2) \rangle \\
&= -v_1 \langle \beta(1) | \hat{\mathbf{I}}_{1z} | \beta(1) \rangle \langle \alpha(2) | \alpha(2) \rangle - v_2 \langle \alpha(2) | \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \alpha(2) \rangle \langle \beta(1) | \beta(1) \rangle \\
&= -\left(-\frac{v_1}{2}\right) - \left(\frac{v_2}{2}\right) = \frac{(v_1 - v_2)}{2} \tag{II. 49}
\end{aligned}$$

e finalmente para  $E_4$ ,

$$\begin{aligned}
E_4 &= \langle \Psi_4 | \hat{\mathcal{H}}^{(0)} | \Psi_4 \rangle = \langle \beta(1)\beta(2) | -v_1 \hat{\mathbf{I}}_{1z} - v_2 \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \beta(1)\beta(2) \rangle \\
&= -v_1 \langle \beta(1) | \hat{\mathbf{I}}_{1z} | \beta(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta(2) \rangle - v_2 \langle \beta(2) | \hat{\mathbf{I}}_{2z} | \beta(2) \rangle \langle \beta(1) | \beta(1) \rangle \\
&= -\left(-\frac{v_1}{2}\right) - \frac{v_2}{2} \\
&= \frac{(v_1 + v_2)}{2} \tag{II. 50}
\end{aligned}$$

Considerando  $v_1 > v_2$ , o diagrama de energias é

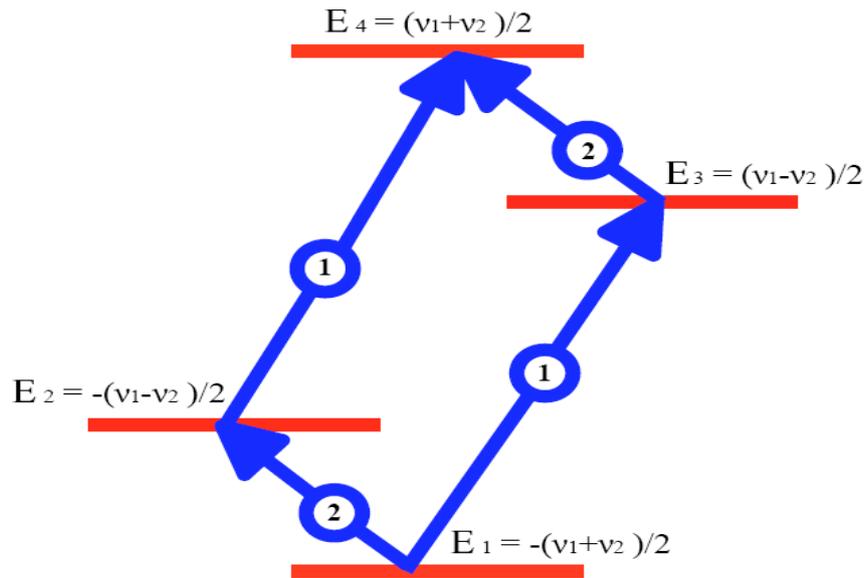


Figura II.10: As transições de energias dos núcleos 1 e 2.

As transições, uma do núcleo 1, com frequência  $\nu_1$  e outra, do núcleo 2, com frequência  $\nu_2$ , correspondem, respectivamente a

$\Psi_1 \rightarrow \Psi_3$  transição  $\alpha(1) \rightarrow \beta(1)$  com núcleo 2 em estado  $\alpha$

$\Psi_2 \rightarrow \Psi_4$  transição  $\alpha(1) \rightarrow \beta(1)$  com núcleo 2 em estado  $\beta$

com

$$E_3 - E_1 = E_4 - E_2 = \nu_1 \quad (\text{II. 51})$$

$\Psi_1 \rightarrow \Psi_2$  transição  $\alpha(2) \rightarrow \beta(2)$  com núcleo 1 em estado  $\alpha$

$\Psi_3 \rightarrow \Psi_4$  transição  $\alpha(1) \rightarrow \beta(1)$  com núcleo 2 em estado  $\beta$

com

$$E_2 - E_1 = E_4 - E_3 = \nu_2 \quad (\text{II. 52})$$

Graficamente, e abreviando  $\alpha(1) \alpha(2)$  para  $\alpha\alpha$ , etc., temos simplesmente



Figura II.11: Transições possíveis para os núcleos 1 e 2.

Note-se que não se consideraram como transições possíveis

$$\Psi_1 \rightarrow \Psi_4$$

$$\Psi_2 \rightarrow \Psi_3$$

que supõem alterações concomitantes dos spins dos dois núcleos [7, 15]. Isto não surpreenderá, pois cada fóton *R.F.* deverá afetar o estado de um núcleo apenas (ver, porém, mais adiante). Na verdade, aquelas transições não satisfazem a regra de seleção

$$\Delta m_t = -1,$$

pois, para

$$\Psi_1 \rightarrow \Psi_4$$

seria,

$$\Delta m_t = -2$$

e, para

$$\Psi_2 \rightarrow \Psi_3$$

$$\Delta m_t = 0$$

Se  $\nu_1 = \nu_2 = \nu$ , isto é, se os núcleos forem equivalentes, caso  $A_2$  com  $J = 0$ , então  $\Psi_2 \equiv \Psi_3$  e  $E_2 \equiv E_3$ . O diagrama de energias será

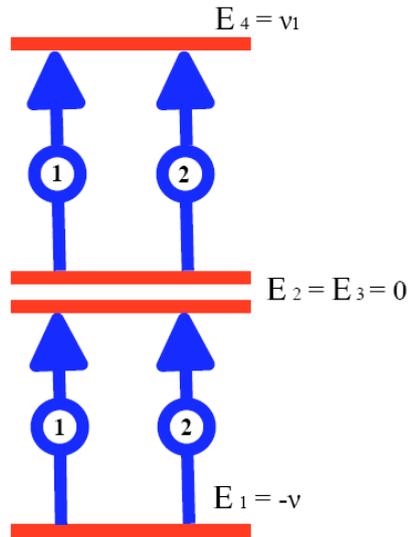


Figura II.12: As transições de energias dos núcleos 1 e 2.

e haverá, como é esperado, uma só frequência de ressonância  $\nu_1 = \nu_2 = \nu$  [6, 7, 9].

## 2.11 O princípio da incerteza e a largura dos sinais de RMN

Tal como acontece em outras técnicas espectroscópicas, as linhas espectrais em RMN não são linhas infinitamente estreitas. Isto é, não se verificam transições apenas quando a condição de ressonância  $\nu = \frac{\omega_0}{2\pi}$  é rigorosamente atingida, mas existe, uma certa probabilidade de transição, para  $\nu \leq \frac{\omega_0}{2\pi}$  e  $\nu \geq \frac{\omega_0}{2\pi}$ , com um máximo para  $\nu = \frac{\omega_0}{2\pi}$  (fig2.9).

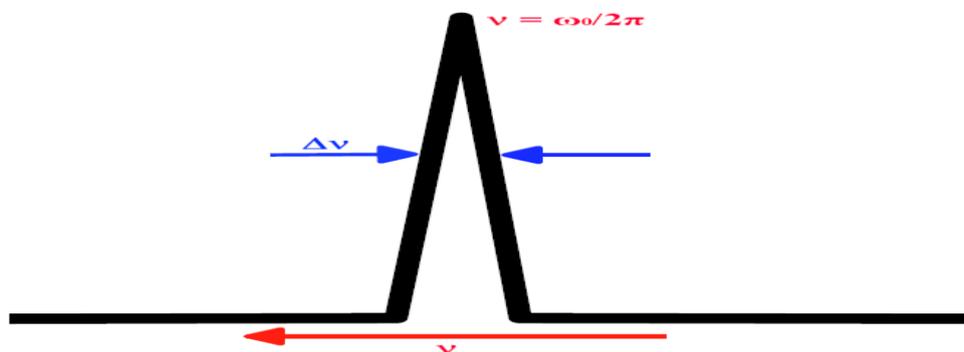


Figura II.13: As linhas espectrais não são infinitamente estreitas

Isto é, devido a incerteza nos valores da energia dos estados de spin, incerteza  $\delta E_i$  que, de acordo com o Princípio de Heisenberg, é tanto maior quanto menor for o tempo de vida  $\tau_i$  de cada estado

$$\delta E_i \tau_i \simeq \hbar \quad (\text{II. 53})$$

Dado que os tempos de vida  $\tau_i$  são comparativamente elevados, da ordem de segundos, quando, por exemplo, para estados vibracionais e rotacionais moleculares são da ordem de  $10^{-6} - 10^{-9} \text{s}$ ,  $\delta E_i$  é pequeno, contribuindo apenas com cerca de  $0,1 \text{Hz}$  para a largura da linha do sinal de ressonância.

O alargamento dos sinais RMN quando o regime de troca começa a afetar o espectro RMN pode ser interpretado em termos do Princípio de incerteza de Heisenberg. Se o tempo de vida de um núcleo numa forma A for  $\tau_A$ , então a incerteza na energia é dada por

$$\Delta E \cdot \tau_A \simeq \frac{h}{2\pi} \quad (\text{II. 54})$$

e na frequência

$$\Delta \nu = \frac{1}{2\pi\tau_A} \quad (\text{II. 55})$$

Teremos, portanto nestas condições do regime de troca, sinais tanto mais largos quanto menor for  $\tau_A$ . O efeito será mais notório se  $\tau_A \leq T_2$ , onde  $T_2$  inclui a contribuição do tempo de relaxação transversal e a da não-homogeneidade do campo [6, 16].

## 2.12 Computação Quântica via RMN

Quais são os requisitos básicos para se construir um computador quântico? Os elementos básicos da teoria são os bits quânticos, qubits, sistemas quânticos de dois níveis. Para construir tal aparato, devemos selecionar um sistema físico do qual se possa fazer uso da manipulação da informação contida no sistema.

As condições para a computação quântica ser implementada via RMN, são basicamente as seguintes:

- 1- Possuir uma representação para o qubit: *O spin de um núcleo atômico;*
- 2- Evolução unitária: *Transformações unitárias (operadores de rotação) são construídas através de pulsos de RF aplicados a spins em um campo magnético estático. O acoplamento entre os spins ocorre por meio de ligações químicas entre átomos vizinhos;*
- 3- Preparar o estado inicial: *Polarização dos spins em um forte campo magnético e uso de técnicas de preparação de estados puros;*

4- Medir o resultado da saída: *Medida da voltagem induzida por momentos magnéticos que precessionam;*

Dificuldades: *A preparação de estados puros* reduz o sinal exponencialmente no número de qubits, a menos que a polarização inicial seja suficientemente alta. Tais dificuldades parecem apenas, ser de cunho tecnológico, em 2004, Rugar *et al* [18], detectaram o sinal magnético de um único spin [19].

Uma vez superando-se os problemas técnicos, fatores como o tempo de coerência dos sistemas nucleares, a completa descrição do sistema através de operadores unitários, e o grande desenvolvimento técnico/experimental de manipulação dos spins nucleares, fazem da RMN a técnica experimental mais poderosa e bem sucedida no campo da computação quântica. No momento a RMN é a que fornece maiores requisitos para o desenvolvimento da computação quântica, com o advento de novas tecnologias e técnicas experimentais.

## Capítulo III

### 3 Geometria e Informação Quântica

---

Neste capítulo, veremos que operações com um único qubit (spin -  $\frac{1}{2}$ ) na presença de um campo magnético  $\mathbf{B}_0$ , são representadas na esfera de Bloch, e que o vetor estado guarda toda a informação do sistema.

Em princípio, é impossível representar os estados de um sistema com vários qubits (spin's-  $\frac{1}{2}$ ) na esfera de Bloch, melhor dizendo, não é possível representar sistemas com interação via esfera de Bloch.

Assim, iremos abordar o desenvolvimento da representação de um qubit na esfera de Bloch e algumas propriedades na mesma, generalizaremos esse conceito através de uma reparametrização da própria esfera de Bloch, para obtermos o que doravante denominamos “*esfera de Bodocongó*”. Esta é uma representação de um espaço que pode cobrir toda a esfera ou parte dela, na forma de “calotas” que, associamos a qubits imersos em uma esfera bidimensional. Tal procedimento se mostra bastante útil para podermos representar um sistema com interação de vários qubits com suas respectivas operações entre constituintes.

---

#### 3.1 A esfera de Bloch

O bit é o ente fundamental da computação clássica. Já a computação quântica é construída tendo por base um conceito análogo, o *bit quântico* ou *qubit*. A diferença principal entre bits e qubits é que um qubit  $|\psi\rangle$  é uma combinação linear dos autovetores  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , ou seja,

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (\text{III.1})$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são números complexos em geral, embora em diversas ocasiões possam ser reais, os kets  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  representam os vetores:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad e \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Observemos então que os autovetores  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  pertencem a um espaço vetorial complexo  $\mathbb{C}^2$ , formado uma base ortonormal para esse *espaço vetorial*. Essa propriedade de superposição de estados de um qubit é contra-intuitiva, e vai de encontro ao senso comum quando nos sistemas no mundo clássico.

Em computação quântica, tal base é chamada de *base computacional* e o autovetor  $|\psi\rangle$  é conhecido como a superposição dos autovetores  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , com *amplitudes*  $\alpha$  e  $\beta$ .

A interpretação física para um único qubit é que ele pode está simultaneamente nos estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Isso nos faz pensar que a quantidade de informação contida no estado  $|\psi\rangle$  pode ser infinita, já que teríamos infinitos pontos na superfície da esfera de Bloch (fig.III.1). No entanto, essa quantidade infinita de informação se encontra no *nível quântico*. Para termos acesso a tamanha quantidade de informação, precisamos fazer uso de uma *medida*. Ai, então, temos que levar em conta um dos postulados da mecânica quântica segundo o qual um processo de medição altera o estado de um qubit, fazendo com que o qubit assumo o estado  $|0\rangle$ , com probabilidade  $|\alpha|^2$ , ou o estado  $|1\rangle$ , com probabilidade  $|\beta|^2$ .

Qualquer estado  $|\psi\rangle$  de uma partícula de *spin*  $1/2$  pode ser então, escrito na forma da equação (III.1). Portanto, as partículas de *spin*  $1/2$  serão tratadas aqui como sendo *sistemas de dois níveis*, os chamados *qubits* na computação quântica.

A esfera de Bloch (Fig. III.1) surge como uma ferramenta geométrica poderosa na descrição de um único qubit, porque o estado de um qubit representado por um ponto sobre sua superfície, pode ser relacionado com grandezas físicas para a descrição de um sistema de dois níveis.

Entretanto, devemos sempre lembrar que essa representação é para um único qubit e portanto limitada, pois não existe uma generalização simples da esfera de Bloch para muitos qubits [2].

A esfera de Bloch é uma generalização da representação de um número complexo  $Z$ , sendo  $|Z|^2 = 1$  um conjunto de pontos no círculo unitário no plano complexo.

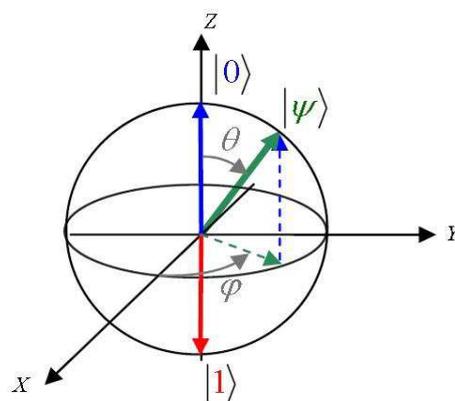


Fig. III.1 - Esfera de Bloch.

Um único qubit pode ser visualizado de forma genérica como sendo o conjunto de pontos tipo  $(\theta, \varphi)$  na superfície de uma esfera unitária,

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

Tal esfera é parametrizada por  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , que em coordenadas esféricas, correspondem à latitude e longitude respectivamente.

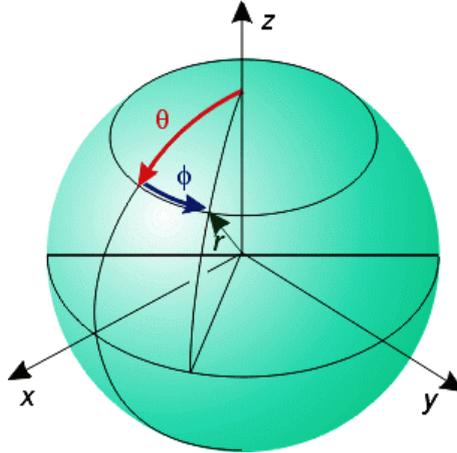


Figura III.2: Esfera unitária com coordenadas  $(\theta, \varphi)$ .

A relação entre estados puros de um qubit e os pontos na superfície da esfera de Bloch será dada pelo vetor  $\mathbf{r} = (X, Y, Z)$ , definido como,

$$X = \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (\text{III. 3. a})$$

$$Y = \sin(\theta) \sin(\varphi) \quad (\text{III. 3. b})$$

$$Z = \cos(\theta) \quad (\text{III. 3. c})$$

Logo, o vetor  $[\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta)]$  é chamado de vetor de Bloch, representando assim um ponto qualquer na superfície da esfera de Bloch, tal que a superposição dos autoestados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  é dada por

$$|\psi\rangle = Z|0\rangle + (X + iY)|1\rangle \quad (\text{III. 4})$$

Confira a equação III.2.

### 3.1.2 Propriedades da esfera de Bloch

Operações sobre um qubit, ou seja, na esfera de Bloch, devem preservar a norma, portanto são descritas por matrizes unitárias  $2 \times 2$ . Dentre essas, as *matrizes de Pauli* são umas das mais importantes e são dadas por:

$$\sigma_X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 5. a})$$

$$\sigma_Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 5. b})$$

$$\sigma_Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 5. c})$$

Com essas matrizes, podemos escrever uma outra classe de matrizes unitárias, as matrizes de rotação, que são definidas como:

$$R_X(\theta) \equiv e^{-i\theta\frac{\sigma_X}{2}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbb{1} - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_X \quad (\text{III. 6. a})$$

$$R_Y(\theta) \equiv e^{-i\theta\frac{\sigma_Y}{2}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbb{1} - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_Y \quad (\text{III. 6. b})$$

$$R_Z(\theta) \equiv e^{-i\theta\frac{\sigma_Z}{2}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbb{1} - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_Z \quad (\text{III. 6. c})$$

As equações (III.6) representam rotações em torno dos eixos  $O_x$ ,  $O_y$  e  $O_z$  na esfera unitária do  $\mathbb{R}^3$ . A partir de tais matrizes de rotação, podemos representar qualquer tipo de *operador unitário* de um qubit, ou seja, qualquer operador unitário que atue na esfera de Bloch [2].

### 3.3 A geometria do espaço euclidiano

O espaço euclidiano é absolutamente uniforme, ou seja, *homogêneo*. Esta uniformidade do espaço euclidiano é uma característica fundamental dessa geometria, surgindo assim o conceito de isometria do  $\mathbb{R}^3$ , também chamada de movimento rígido de  $\mathbb{R}^3$ , por preservar a norma [20].

Todas as propriedades geométricas familiares de uma *figura*: tais como comprimento, área, volume, ângulos, etc., são derivados de distâncias: *norma*.

Por exemplo, o comprimento de um polígono é a soma das distâncias entre seus vértices. A área de um retângulo, por exemplo, é o produto de seu comprimento pela sua largura, já o volume de uma caixa retangular é o produto do comprimento pela sua altura pela sua largura, e as áreas e volumes de regiões mais *complicadas*, podem ser aproximados com o preenchimento de pequenos retângulos ou caixas.

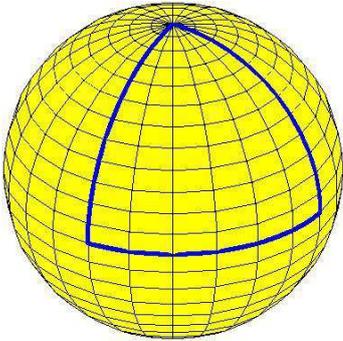


Figura III.3.a

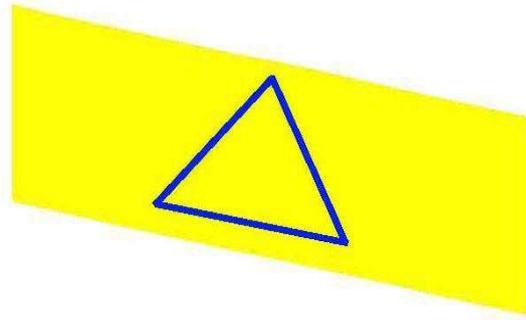


Figura III.3.b

Figura III.3.a e 3.b: Triângulo esférico e Triângulo Euclidiano.

Considerando que isometrias preservam a norma, conseqüentemente, preservam também comprimentos, ângulos, áreas, e volumes. Em resumo, isometrias preservam o tamanho e a forma de toda figura geométrica [21].

Há várias outras geometrias tais como, a esférica, a hiperbólica, etc. Mas estudaremos aqui, apenas a geometria esférica, com algumas diferenças intrigantes. Na geometria euclideana a soma dos ângulos internos de um triângulo qualquer é sempre  $180^\circ$ . Enquanto que, na geometria esférica, tal soma é sempre *maior* que  $180^\circ$ , sendo que a diferença é proporcional à área do triângulo (ver Figura III.3).

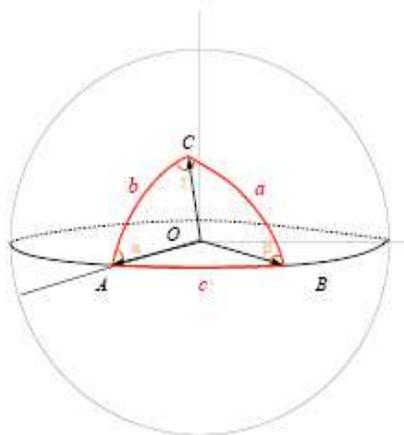


Figura III.4: Triângulo esférico qualquer.

### 3.4 Geometria esférica - A esfera $\mathbb{S}^2$ no $\mathbb{R}^3$

O rompimento real com a geometria euclidiana só veio ocorrer, com a teoria da Relatividade geral de Einstein, formulada muitos anos depois [22, 23].

A geometria do  $\mathbb{R}^3$ , assim como a do  $\mathbb{R}^2$ , está baseada na fórmula de distância de Pitágoras: a distância entre os pontos  $P_1 = (x_1, y_1, z_1)$  e  $P_2 = (x_2, y_2, z_2)$  é

$$d(P_1, P_2) = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (\text{III. 7})$$

A *distância esférica*  $d_{\mathbb{S}^2}(P_1, P_2)$  entre  $P_1$  e  $P_2 \in \mathbb{S}^2$  é dado pela equação

$$d_{\mathbb{S}^2}(P_1, P_2) = 2\theta = 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} d(P_1, P_2) \right] \quad (\text{III. 8})$$

Sendo  $d_{\mathbb{S}^2}(P_1, P_2)$  uma função de  $d(P_1, P_2)$ , e que "pontos esfericamente eqüidistantes" também são eqüidistantes em  $\mathbb{R}^3$ . Assim, as *linhas* de  $\mathbb{S}^2$  são necessariamente os grandes círculos.

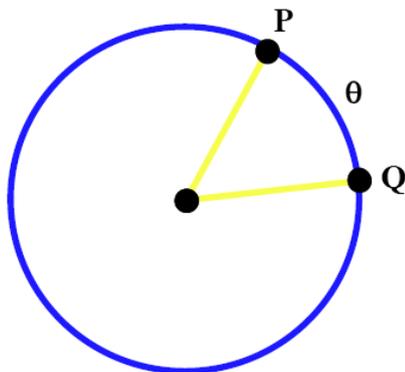


Figura III.5.a

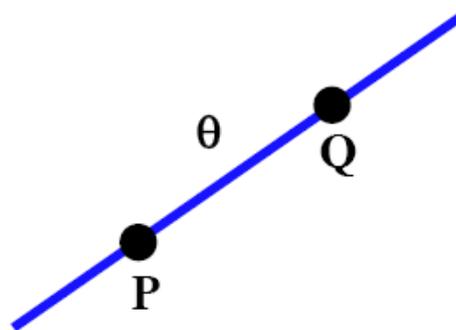


Figura III.5.b

Figura III.5.a e 5.b: Pontos eqüidistantes esféricos e pontos eqüidistantes euclidianos

O ângulo entre dois grandes círculos  $C_1$  e  $C_2$  é exatamente o ângulo entre os planos  $\Pi_1$  e  $\Pi_2$  (fig. III.6).

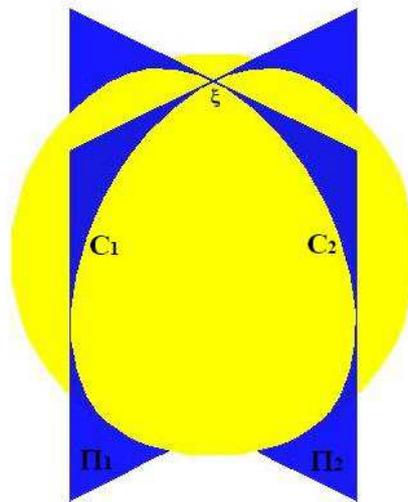


Figura III.6: Ângulo entre grandes círculos.

Como já sabemos, a soma dos ângulos internos de qualquer triângulo euclidiano é  $\pi$ . Em contraste, a esfera tem a seguinte propriedade:

Para qualquer triângulo esférico, com ângulos internos  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$ , a função,

$$\text{Excesso} = \alpha + \beta + \gamma - \pi \quad (\text{III. 9})$$

É proporcional a área do triângulo, e conseqüentemente não-nulo [5, 24]. Uma das conseqüências dessa geometria é o “teorema de Pitágoras” que agora assume a forma,

$$\cos(a) = \cos(b) \cdot \cos(c) \quad (\text{III. 10})$$

$b$  e  $c$  são medidos em radianos ( $rad$ ).

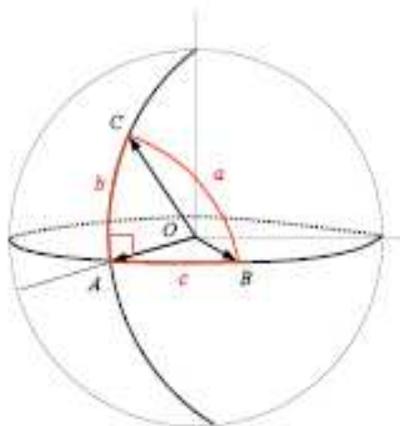


Figura III.7.a

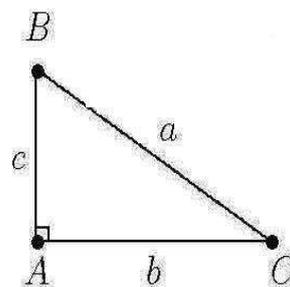


Figura III.7.b

### 3.5 A reparametrização da esfera de Bloch

Seja a esfera de Bloch como a conhecemos, agora reparametrizada pelo “comprimento de arco”  $\widehat{PQ}$  (ver fig. III.8),

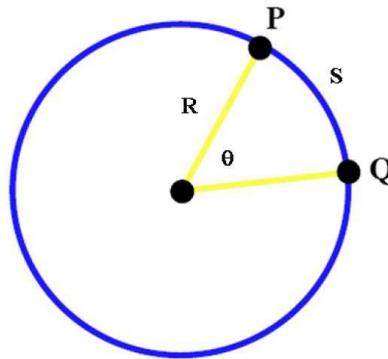


Figura III.8: Comprimento de arco  $\widehat{PQ}$ .

sendo então,  $\theta = \frac{S}{R}$ , logo teremos,

$$X = R \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\varphi) \quad (\text{III. 14. a})$$

$$Y = R \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \operatorname{sen}(\varphi) \quad (\text{III. 14. b})$$

$$Z = R \cos\left(\frac{S}{R}\right) \quad (\text{III. 14. c})$$

Tal esfera agora, é parametrizada por  $0 \leq S \leq \pi$  e  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , para  $R$  fixo podendo eventualmente admitir os valores  $0 \leq R \leq \infty$ , sendo  $S$  o *raio superficial da “calota”* e  $R$  continua sendo o *raio normal da esfera*.

Em um limite em que  $R \rightarrow \infty$ , as equações (III. 14) se transformam em,

$$X = S \cos(\varphi) \quad (\text{III. 14. a})$$

$$Y = S \operatorname{sen}(\varphi) \quad (\text{III. 14. b})$$

$$Z = R \quad (\text{III. 14. c})$$

Agora podemos visualizar a dependência em  $R$ , sofrida pela esfera de Bloch reparametrizada, e investigar o que acontece com a *informação* dos sistemas representados por tal esfera.

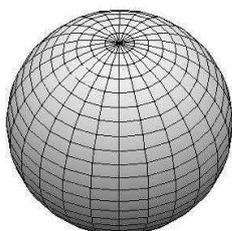


Figura III.11.a

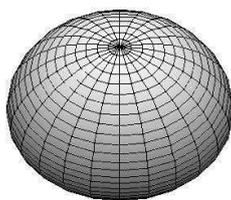


Figura III.11.b

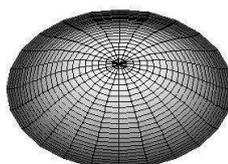


Figura III.11.c

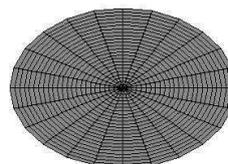


Figura III.11.d

Figura III.9.a, 11.b, 9.c e 9.d: Esfera de Bloch reparametrizada com  $R=1$ ,  $R=2$ ,  $R=3$  e  $R \rightarrow \infty$  respectivamente.

A norma de  $\mathbf{r} = (X, Y, Z)$  é preservada para qualquer valor de  $R$ . Logo podemos sem perda de generalidade escrever,

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{S}{2R}\right)|0\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{S}{2R}\right)|1\rangle \quad (\text{III. 16})$$

A esfera de Bloch, como sabemos, é uma representação para um qubit na esfera unitária. A reparametrização pelo comprimento de arco nos mostra uma dependência com o raio normal  $R$  da esfera.

Contudo, ainda temos uma condição a ser imposta, que é, fixar o *tamanho da calota*. Agora, nessa nova representação, o *raio superficial*,  $S = \pi[\text{u. c.} - \text{unidade de comprimento}]$ , por definição, será igual a “unidade”.

Assim, o comprimento da circunferência, que nesse caso é um *grande círculo* será,  $C = 2\pi R$ ; sendo  $R = 1$ , teremos então que  $C = 2\pi$ .

Teremos então  $\overline{AB} = \pi[\text{u. c.}]$  e  $\widehat{AB} = \frac{\pi[\text{u.c.}]}{1.[\text{u.c.}]}$ , ou seja,  $\widehat{AB} = \pi \text{ rad.}$

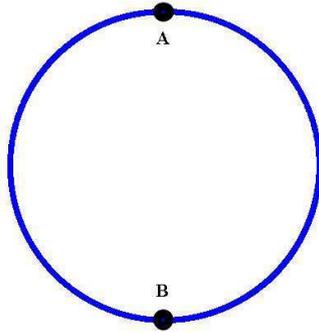


Figura III.10: Segmento AB.

Agora, o que temos é uma nova representação para um qubit. Como o vetor-estado  $|\psi\rangle$  varre toda esfera, e toda “informação” está contida na superfície, é natural perguntarmos, o que acontece com a informação quando  $R$  cresce?

Logo, com  $0 \leq S \leq \pi$  e  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  e  $R = 1, 2, 3, \dots$ , temos:

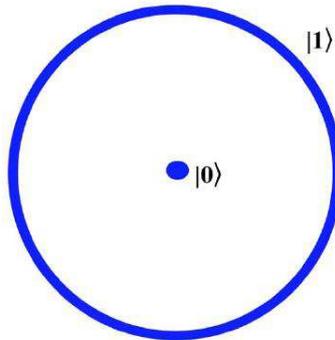


Figura III.11: A “calota” vista por uma *normal* ao pólo norte.

Assim, podemos ver que,  $S = S_1 = S_2 = S_3 = \dots = S_4$ , para os respectivos  $R_i=1, 2, 3, \dots$ , é isoperimétrico, ou seja,  $S$  é fixo e mede  $\pi$  [u.c.].

Como se mantém constante o tamanho de  $S$ , temos uma compensação entre  $R$  e  $\theta$ , quando estivermos estudando a *evolução* de um sistema de dois níveis, sobre os efeitos geométricos no mesmo, ou seja, quando o *raio normal*  $R$ , ficar infinitamente grande em relação ao *raio superficial*  $S$ . O que tal constituinte irá perceber, são os efeitos da *curvatura*, que diminuirá com o aumento do  $R$  ( $\kappa = \frac{1}{R^2}$ ), ou seja, para tal, teremos esferas, hemisférios, calotas e discos(planos) imersos, (que de agora em diante chamaremos de “calotas”, indistintamente) em uma “esfera maior”, à qual o sistema pertence e sente os efeitos de sua mudança.

Como veremos adiante, chegamos ao que chamamos de *esfera de Bodocongó*, uma esfera bidimensional na qual esta imersa a *esfera de Bloch* reparametrizada. Para ( $R = 1$  u.c.), temos a estrutura de uma esfera, já que  $S$  e  $\theta$  coincidem, e toda esfera de Bodocongó é *coberta*.

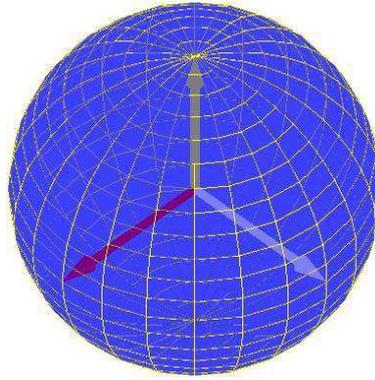


Figura III.12: Esfera de Bloch imersa na esfera de Bodecongó com  $R=1$ .

Para ( $R = 2 u.c.$ ), teremos um hemisfério imerso. Do ponto de vista topológico este hemisfério é um disco fechado [25].

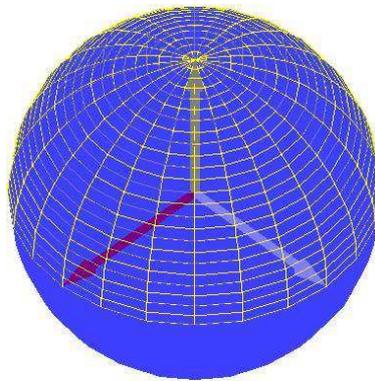


Figura III.13: Esfera de Bloch imersa na esfera de Bodecongó com  $R=2$ .

Para ( $R = 3 u.c.$ ) teremos uma calota imersa, agora com curvatura menor,

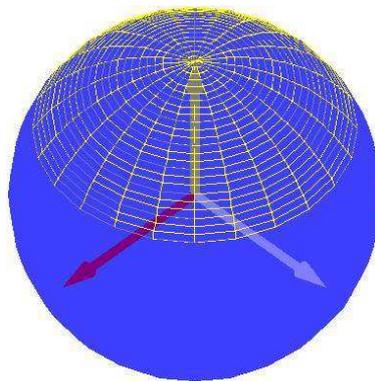


Figura III.14: Esfera de Bloch imersa na esfera de Bodecongó com  $R=3$ .

Até que no limite de  $R \rightarrow \infty$ , teremos um disco, com curvatura nula, vemos que a esfera de Bloch reparametrizada, foi a cada passo, sendo deformada, compactada, até que no limite de  $R \rightarrow \infty$ , temos um *plano*, com curvatura nula.

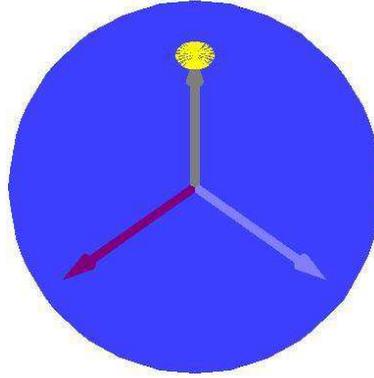


Figura III.15: Esfera de Bloch imersa na esfera de Bodocongó com  $R \rightarrow \infty$ .

Com a evolução em  $R$  da esfera de Bodocongó, vemos que a posição da esfera de Bloch reparametrizada permanece invariante em relação ao eixo  $Z$  (Figura III.16). O que acontecerá se “mudarmos” a esfera de Bloch de posição? Ou seja, rotacioná-la? Veja que aqui, na esfera de Bodocongó, podemos rotacionar toda a esfera de Bloch, que é completamente diferente de aplicarmos um operador unitário de rotação sob os estados superpostos  $|\psi\rangle$  da esfera de Bloch.

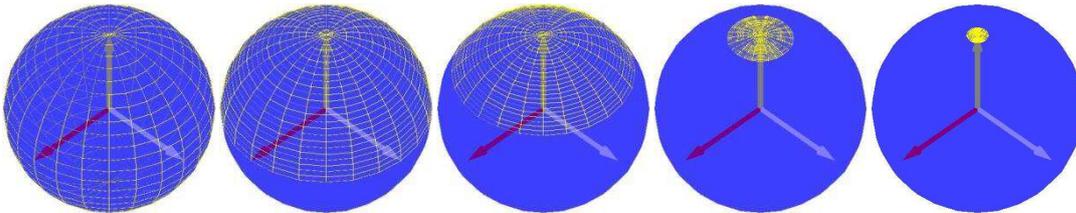


Figura III.16: Posição invariante da esfera de Bloch imersa na esfera de Bodocongó com variação no raio de  $R=1$  até  $R \rightarrow \infty$ .

Para um estado geral de uma *CALOTA*, e pela equação (III.4), segue que, se

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\varphi) \\ \text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \text{sen}(\varphi) \\ \cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} \quad (\text{III. 17})$$

Os operadores de rotação da esfera de Bloch re-parametrizada, serão dados por:

$$R_X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\text{sen}(\alpha) \\ 0 & \text{sen}(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \quad (\text{III. 18})$$

$$R_Y = \begin{bmatrix} \cos(\beta) & 0 & \text{sen}(\beta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\text{sen}(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{bmatrix} \quad (\text{III. 19})$$

$$R_Z = \begin{bmatrix} \cos(\gamma) & -\text{sen}(\gamma) & 0 \\ \text{sen}(\gamma) & \cos(\gamma) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 20})$$

Estas matrizes representam rotações em torno dos eixos  $X$ ,  $Y$  e  $Z$  na esfera unitária do  $\mathbb{R}^3$  [26, 27].

Logo, para uma aplicação dos três operadores, teremos  $R_{XYZ}\mathbf{V} \equiv [R_X R_Y R_Z]$ , que tem o significado

$$R_{XYZ}\mathbf{V} \equiv [R_Z[R_Y[R_X\mathbf{V}]]] \quad (\text{III. 21})$$

Assim teremos, para uma rotação em relação ao eixo  $X$ ,

$$R_X\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\varphi) \\ \cos(\alpha)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\varphi) - \text{sen}(\alpha)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \\ \text{sen}(\alpha)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos(\alpha)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{III. 22})$$

Para uma rotação em relação ao eixo  $Y$ ,

$$R_Y\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \cos(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \text{sen}(\beta)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \\ \text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\varphi) \\ -\text{sen}(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos(\beta)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{III. 23})$$

Para uma rotação em relação ao eixo  $Z$ ,

$$R_Z\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \cos(\gamma)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\varphi) - \text{sen}(\gamma)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \\ \text{sen}(\gamma)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\varphi) + \cos(\gamma)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \\ \cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{III. 24})$$

E finalmente, para uma rotação em relação a um eixo qualquer, teremos a combinação de  $R_X\mathbf{V}$ ,  $R_Y\mathbf{V}$  e  $R_Z\mathbf{V}$  [28],

$$\begin{aligned}
R_{XYZ}\mathbf{V} = & \\
& \left[ \begin{array}{c} \text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\varphi) \\ \cos(\alpha)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\varphi) - \text{sen}(\alpha)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \\ \text{sen}(\alpha)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos(\alpha)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} \cos(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \text{sen}(\beta)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \\ \text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\varphi) \\ -\text{sen}(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos(\beta)\cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{array} \right] \\
& \left[ \begin{array}{c} \cos(\gamma)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\varphi) - \text{sen}(\gamma)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \\ \text{sen}(\gamma)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\varphi) + \cos(\gamma)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \\ \cos\left(\frac{S}{R}\right) \end{array} \right] \quad (\text{III. 25})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_{XYZ}\mathbf{V} = & \\
& \left[ \begin{array}{c} \cos(\gamma)\cos(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) - \text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\gamma)\cos(\alpha) + \text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\gamma)\text{sen}(\beta)\text{sen}(\alpha) + \\ \cos\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\gamma)\text{sen}(\alpha) + \cos\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\gamma)\text{sen}(\beta)\cos(\alpha) \\ \text{sen}(\gamma)\cos(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\gamma)\cos(\alpha) + \text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\gamma)\text{sen}(\beta)\text{sen}(\alpha) - \\ \cos\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\gamma)\text{sen}(\alpha) + \cos\left(\frac{S}{R}\right)\text{sen}(\gamma)\text{sen}(\beta)\cos(\alpha) \\ -\text{sen}(\beta)\cos(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos(\beta)\text{sen}(\alpha)\text{sen}(\varphi)\text{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos\left(\frac{S}{R}\right)\cos(\alpha)\cos(\beta) \end{array} \right] \\
& \quad (\text{III. 26})
\end{aligned}$$

### 3.6 A esfera de Bodocongó - Um modelo para vários qubits

Vimos que, a rotação sofrida pela esfera de Bloch, reparametrizada, é diferente da aplicação de operadores de rotação sob a esfera de Bloch. Com isso, os autovetores não serão alterados. O que teremos são *esferas* concêntricas, para o caso ( $R = 1 \text{ u. c.}$ ). Já para o caso em que haja evolução do raio normal, haverá diminuição da curvatura, em calotas e discos ( $R \rightarrow \infty$ ). Utilizando esses resultados será possível estudar, por exemplo, um sistema de *spins*  $\frac{1}{2}$  acoplados na presença de um campo magnético, ou seja, agora temos a possibilidade de tratarmos de mais de uma esfera de Bloch no sistema, e com interação entre *elas*.

Em uma nova reparametrização, agora na esfera de Bodocongó, tomando as coordenadas esféricas  $\theta$  e  $\varphi$ , como *frequência angular*, já que, como vimos, distâncias na superfície de uma esfera, pode ser tanto *ângulos* ou *medidas* em

radianos. Teremos frente a uma normalização de frequências de ressonância e acoplamento via “*triangulação*”, a *posição* e a *distância* entre os constituintes do sistema de *spins*  $\frac{1}{2}$ , ou seja, entre as esferas de Bloch reparametrizadas.

### 3.6.1 Propriedades da esfera de Bodocongó

As propriedades aqui atribuídas à esfera de Bodocongó, estão relacionadas às “posições” que cada esfera de Bloch reparametrizada ocupará em sua superfície, ao qual estão imersas. Assim, o que teremos para cada sistema, são posições e distâncias distintas, representando a frequência de ressonância e o acoplamento, ou seja, a interação entre os qubits, como será explorado no capítulo seguinte.

Assim, para uma esfera de Bloch reparametrizada rotacionada na direção  $O_x$ , temos,

$$|\psi\rangle_{X;\alpha} = \left[ \text{sen}(\alpha) \text{sen}(\varphi) \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) + \text{cos}(\alpha) \text{cos}\left(\frac{S}{2R}\right) \right] |0\rangle + \left[ \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \text{cos}(\varphi) + i \left( \text{cos}(\alpha) \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \text{sen}(\varphi) - \text{sen}(\alpha) \text{cos}\left(\frac{S}{2R}\right) \right) \right] |1\rangle \quad (\text{III. 27})$$

Para o caso em que  $\alpha = 0$ , recuperamos a estrutura da esfera de Bloch reparametrizada,

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=0} = \text{cos}\left(\frac{S}{2R}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) |1\rangle \quad (\text{III. 28})$$

e para uma esfera de Bloch reparametrizada rotacionada na direção  $O_y$ , temos

$$|\psi\rangle_{Y;\beta} = \left[ -\text{sen}(\beta) \text{cos}(\varphi) \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) + \text{cos}(\beta) \text{cos}\left(\frac{S}{2R}\right) \right] |0\rangle + \left[ \text{cos}(\beta) \text{cos}(\varphi) \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) + \text{sen}(\beta) \text{cos}\left(\frac{S}{2R}\right) + i \left( \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \text{sen}(\varphi) \right) \right] |1\rangle \quad (\text{III. 29})$$

Para o caso em que  $\beta=0$ , recuperamos a estrutura da esfera de Bloch reparametrizada,

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=0} = \text{cos}\left(\frac{S}{2R}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) |1\rangle \quad (\text{III. 30})$$

e para uma esfera de Bloch re-parametrizada rotacionada na direção  $O_z$ , temos

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma} = \left[ \cos\left(\frac{S}{2R}\right) \right] |0\rangle + \left[ \cos(\gamma) \cos(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) - \operatorname{sen}(\gamma) \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) + i \left( \operatorname{sen}(\gamma) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \cos(\varphi) + \cos(\gamma) \cdot \operatorname{sen}(\varphi) \cdot \operatorname{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \right) \right] |1\rangle \quad (\text{III. 31})$$

Para o caso em que  $\gamma = 0$ , recuperamos a estrutura da esfera de Bloch reparametrizada,

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=0} = \cos\left(\frac{S}{2R}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \operatorname{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) |1\rangle \quad (\text{III. 32})$$

e finalmente para uma esfera de Bloch re-parametrizada rotacionada em uma direção qualquer  $O_{XYZ}$ , temos

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{XYZ;a\beta\gamma} = & \left[ -\operatorname{sen}(\beta) \cos(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \cos(\beta) \operatorname{sen}(\alpha) \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \right. \\ & \left. \cos\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\alpha) \cos(\beta) \right] |0\rangle + \left[ \cos(\gamma) \cos(\beta) \cos(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) - \right. \\ & \left. \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \operatorname{sen}(\gamma) \cos(\alpha) + \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\gamma) \operatorname{sen}(\beta) \operatorname{sen}(\alpha) + \right. \\ & \left. \cos\left(\frac{S}{R}\right) \operatorname{sen}(\gamma) \operatorname{sen}(\alpha) + \cos\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\gamma) \operatorname{sen}(\beta) \cos(\alpha) + \right. \\ & \left. i \left( \operatorname{sen}(\gamma) \cos(\beta) \cos(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) + \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\gamma) \cos(\alpha) + \right. \right. \\ & \left. \left. \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}\left(\frac{S}{R}\right) \operatorname{sen}(\gamma) \operatorname{sen}(\beta) \operatorname{sen}(\alpha) - \cos\left(\frac{S}{R}\right) \cos(\gamma) \operatorname{sen}(\alpha) + \right. \right. \\ & \left. \left. \cos\left(\frac{S}{R}\right) \operatorname{sen}(\gamma) \operatorname{sen}(\beta) \cos(\alpha) \right) \right] |1\rangle \quad (\text{III. 33}) \end{aligned}$$

$\alpha = \beta = \gamma = 0$ , recuperamos a estrutura da esfera de Bloch.

$$|\psi\rangle_{XYZ;a=\beta=\gamma=0} = \cos\left(\frac{S}{2R}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \operatorname{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) |1\rangle \quad (\text{III. 34})$$

As tabelas III.1 e III.2 trazem uma análise dos casos em que  $R = 1$  e  $R \rightarrow \infty$ , e vemos que no caso em que  $R = 1$  e  $\alpha = \beta = \gamma = 0$ , recuperamos a estrutura da *esfera de Bloch*. Todos os estados investigados são *normalizados*.

<i>Esfera de Bloch</i>			
<i>Estado</i>	$\varphi = 0; \theta = \frac{\pi}{2}$	$\varphi = \frac{\pi}{2}; \theta = \frac{\pi}{2}$	$\varphi = \pi; \theta = \frac{\pi}{2}$
$ \psi\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
<i>Esfera de Bloch reparametrizada na Esfera de Bodocongó</i>			
<i>Estado</i>	$\varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1$	$\varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1$	$\varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1$
$ \psi\rangle_{\alpha=\beta=\gamma=0}$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
$ \psi\rangle_{X;\alpha=\pi/4}$	$\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle + \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i\left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$	$ 0\rangle$	$\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle - \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$
$ \psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2}$	$\left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i\left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$-\left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$
$ \psi\rangle_{X;\alpha=3\pi/4}$	$-\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle + \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i\left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$	$^{-i 1\rangle}$	$-\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle - \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Y;\beta=\pi/4}$	$ 1\rangle$	$\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle + \left[i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + \left(\frac{1}{2}\right)\right] 1\rangle$	$ 0\rangle$
$ \psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2}$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Y;\beta=3\pi/4}$	$^{- 0\rangle}$	$-\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle + \left[\left(\frac{1}{2}\right) + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] 1\rangle$	$ 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Z;\gamma=\pi}$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
			$\varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1$
			$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
			$^{-i 1\rangle}$
			$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
			$^{- 0\rangle}$
			$\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle \left[\left(\frac{1}{2}\right) - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] 1\rangle$
			$\left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] 1\rangle$
			$-\left(\frac{1}{2}\right) 0\rangle + \left[\left(\frac{1}{2}\right) - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] 1\rangle$
			$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$

Tabela III.1: Esfera de Bodocongó para R=1.

<i>Esfera de Bloch</i>			
<i>Estado</i>	$\varphi = 0; \theta = \frac{\pi}{2}$	$\varphi = \frac{\pi}{2}; \theta = \frac{\pi}{2}$	$\varphi = \pi; \theta = \frac{\pi}{2}$
$ \psi\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
			$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
	$\varphi = 0; \theta = \frac{\pi}{2}$	$\varphi = \frac{\pi}{2}; \theta = \frac{\pi}{2}$	$\varphi = \pi; \theta = \frac{\pi}{2}$
			$\varphi = \frac{3\pi}{2}; \theta = \frac{\pi}{2}$

<i>Esfera de Bloch reparametrizada na Esfera de Bodocongó</i>			
<i>Estado</i>	$\varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$	$\varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$	$\varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$
$ \psi\rangle_{\alpha=\beta=\gamma=0}$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$
$ \psi\rangle_{X;\alpha=\pi/4}$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
$ \psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2}$	$-i 1\rangle$	$-i 1\rangle$	$-i 1\rangle$
$ \psi\rangle_{X;\alpha=3\pi/4}$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Y;\beta=\pi/4}$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2}$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Y;\beta=3\pi/4}$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$	$-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) 1\rangle$
$ \psi\rangle_{Z;\gamma=\pi}$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$
	$\varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$	$\varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$	$\varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$
			$\varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty$

Tabela III.2: Esfera de Bodocongó para  $R \rightarrow \infty$ .

# Capítulo IV

## 4 Aplicações da esfera de Bodocongó

---

Neste capítulo trataremos de dois casos experimentais (que “confirmaram” o modelo), a molécula usada para a implementação do algoritmo de Shor, com sete qubits e o “contra-exemplo”, o Fulereno ( $C_{60}$ ), e de alguns casos ideais, como aplicações da esfera de Bodocongó.

Com essa nova representação, será possível configurarmos os mais diversos sistemas moleculares (computadores quânticos), como por exemplo: o sistema de três qubits acoplados.

---

### 4.1 Sistemas compostos

Suponha que estejamos interessados em um sistema composto formado por dois (ou mais) sistemas físicos distintos. Como devemos descrever os estados do sistema composto? O postulado seguinte descreve como o espaço de estados de um sistema composto deve ser construído a partir dos espaços de estados dos sistemas individuais.

*Postulado 1:* O espaço de estados de um sistema físico composto é o produto tensorial dos espaços de estados dos sistemas físicos individuais. Se os sistemas forem numerados de 1 até  $n$ , e o sistema  $i$  for preparado no estado  $|\psi\rangle_i$ , decorre que o estado do sistema composto será

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2 \otimes |\psi\rangle_3 \otimes \dots \otimes |\psi\rangle_n. \quad (\text{IV. 1})$$

O postulado 1 permite ainda a definição de uma das idéias mais interessantes e intrigantes associada a sistemas compostos, o emaranhamento. Considere o estado de dois qubits

$$|\psi\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad (\text{IV. 2})$$

esse estado tem a propriedade notável de que não existem estados de um qubit  $|a\rangle$  e  $|b\rangle$  tais que  $|\psi\rangle = |a\rangle|b\rangle = |ab\rangle$ , que é algo pouco compreendido, os estados emaranhados desempenham um papel crucial na computação quântica e na informação quântica [2].

Para um sistema composto de dois qubits, temos:

$$|\psi\rangle_1 = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (\text{IV. 3. a})$$

$$|\psi\rangle_2 = c|0\rangle + d|1\rangle \quad (\text{IV. 3. b})$$

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2 = ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle \quad (\text{IV. 3. c})$$

e para um composto de três qubits:

$$|\psi\rangle_1 = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (\text{IV. 4. a})$$

$$|\psi\rangle_2 = c|0\rangle + d|1\rangle \quad (\text{IV. 4. b})$$

$$|\psi\rangle_3 = e|0\rangle + f|1\rangle \quad (\text{IV. 4. c})$$

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2 \otimes |\psi\rangle_3 = ace|000\rangle + acf|001\rangle + ade|010\rangle + adf|011\rangle \\ + bce|100\rangle + bcf|101\rangle + bde|110\rangle + bdf|111\rangle \quad (\text{IV. 4. d})$$

As “setas” em cores indicam a composição de “caminhos” na superfície da esfera de Bodocongó, ou seja, a conexão entre os estados do sistema composto.

## 4.2 Triangulação

Uma triangulação de um conjunto de pontos consiste em encontrarmos segmentos de retas que conectam esses pontos de tal modo que nenhum desses segmentos cruze com nenhum outro e cada ponto seja vértice de pelo menos um triângulo formado por esses segmentos. Esses segmentos particionam o conjunto de pontos em triângulo, daí o nome triangulação.

Nós escolhemos  $n$  pontos  $p_1, p_2, p_3, \dots, p_n$  na superfície de uma esfera, estes pontos são chamados de *pontos de vértice*. Uma vez escolhidos os pontos de vértice, completamos uma *triangulação* da região, ou seja, traçamos “retas” (arcos de grandes círculos para se obter o triângulo esférico), entre os pontos de vértice de tal modo que as seguintes condições são satisfeitas:

- i. As “retas” formam os lados de uma coleção de triângulos;
- ii. As “retas” não se cruzam;
- iii. Cada ponto de vértice está em pelo menos um triângulo esférico;

- iv. A união dos triângulos forma a esfera;
- v. A coleção de triângulos é *sempre* máxima, ou seja, não restam vértices para conectar.

Nós sempre podemos formar uma triangulação a partir de quaisquer  $n$  pontos de vértice, mas a triangulação não é necessariamente única, podendo existir triangulações diferentes do mesmo conjunto de vértices [26, 27].

A forma mais simples de triangulação que será usada neste trabalho é a que se segue, para *distâncias* entre dois pontos na superfície da esfera,

$$dS^2(P_1, P_2) = 2\theta = 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} d(P_1, P_2) \right] \quad (\text{IV. 5})$$

onde,

$$d(P_1, P_2) = \sqrt{(X_{i+1} - X_i)^2 + (Y_{i+1} - Y_i)^2 + (Z_{i+1} - Z_i)^2} \quad (\text{IV. 6})$$

com,

$$X_i = \operatorname{sen}(\theta_i) \cos(\varphi_i) \quad (\text{IV. 7. a})$$

$$Y_i = \operatorname{sen}(\theta_i) \operatorname{sen}(\varphi_i) \quad (\text{IV. 7. b})$$

$$Z_i = \cos(\theta_i) \quad (\text{IV. 7. c})$$

logo, teremos para uma triangulação de  $n$  pontos, o seguinte sistema de equações,

$$\begin{aligned} dS^2(P_i, P_{i+1}) &= 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(X_{i+1} - X_i)^2 + (Y_{i+1} - Y_i)^2 + (Z_{i+1} - Z_i)^2} \right] \\ dS^2(P_{i+1}, P_{i+2}) &= 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(X_{i+2} - X_{i+1})^2 + (Y_{i+2} - Y_{i+1})^2 + (Z_{i+2} - Z_{i+1})^2} \right] \\ dS^2(P_{i+2}, P_{i+3}) &= 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(X_{i+3} - X_{i+2})^2 + (Y_{i+3} - Y_{i+2})^2 + (Z_{i+3} - Z_{i+2})^2} \right] \\ &\quad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ dS^2(P_{n-1}, P_n) &= 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(X_n - X_{n-1})^2 + (Y_n - Y_{n-1})^2 + (Z_n - Z_{n-1})^2} \right] \\ dS^2(P_n, P_i) &= 2 \operatorname{sen}^{-1} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(X_n - X_i)^2 + (Y_n - Y_i)^2 + (Z_n - Z_i)^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{IV. 8})$$

## 4.3 Configurando um computador quântico

A posição de cada qubit (esfera de Bloch) na esfera de Bodocongó, irá determinar como cada computador quântico (molécula) está configurado, ou seja, para cada novo conjunto de posições de qubits, haverá uma configuração diferente para o computador quântico.

O campo externo através da interação Zeeman, é o que irá determinar tal configuração, pois as frequências de ressonância dos qubits ( $\nu_i$ ), dependem do campo  $\mathbf{B}_0$ . Logo, com a mudança do campo  $\mathbf{B}_0$ , teremos novas posições na esfera de Bodocongó e conseqüentemente uma nova configuração para o computador quântico.

Assim, teremos como aplicações desse formalismo, os seguintes casos:

I - Uma “molécula teórica”;

II - O fulereno  $C_{60}$  ( $J_{ij} = 0$ );

III - A molécula usada na implementação do algoritmo de Shor ( $J_{ij} \neq 0$ ).

## 4.4 O modelo para configurações teóricas de três qubits

Nas secções 4.4.1, 4.4.2 e 4.4.3 apresentamos três modelos, os sistemas teóricos aqui apresentados, para um sistema composto de três qubits, mostram algumas das possíveis configurações para um computador quântico.

### 4.4.1 Triângulo equilátero esférico $\frac{\pi}{2}$

Neste exemplo, para uma molécula com configuração ideal, triângulo equilátero esférico, temos como estados possíveis, ou caminhos possíveis, as amplitudes das eqs. (III-27, III-29, III-31), dados pela (Tab. III.1 -  $R=1$ ),

A equação seguinte (III. 27) mostra a configuração em relação ao eixo  $\theta_x$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha} = \left[ \text{sen}(\alpha) \text{sen}(\varphi) \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) + \cos(\alpha) \cos\left(\frac{S}{2R}\right) \right] |0\rangle + \left[ \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \cos(\varphi) + i \left( \cos(\alpha) \text{sen}\left(\frac{S}{2R}\right) \text{sen}(\varphi) - \text{sen}(\alpha) \cos\left(\frac{S}{2R}\right) \right) \right] |1\rangle$$

Para  $\alpha = \frac{\pi}{2}$  (*fig. IV. 1. a*): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) - i \left( \frac{1}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 9. a})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle - i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 9. b})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = - \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) + i \left( \frac{1}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 9. c})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = - \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle - i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 9. d})$$

A próxima equação (III. 29) mostra a configuração em relação ao eixo  $O_Y$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta} = \left[ -\text{sen}(\beta) \cos(\varphi) \text{sen} \left( \frac{S}{2R} \right) + \cos(\beta) \cos \left( \frac{S}{2R} \right) \right] |0\rangle + \left[ \cos(\beta) \cos(\varphi) \text{sen} \left( \frac{S}{2R} \right) + \text{sen}(\beta) \cos \left( \frac{S}{2R} \right) + i \left( \text{sen} \left( \frac{S}{2R} \right) \text{sen}(\varphi) \right) \right] |1\rangle$$

Para  $\beta = \frac{\pi}{2}$  (*fig. IV. 1. c*): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = - \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle + \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 10. a})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) + i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 10. b})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle + \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 10. c})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) - i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 10. d})$$

A equação seguinte (III. 31) mostra a configuração em relação ao eixo  $O_Z$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma} = \left[ \cos\left(\frac{S}{2R}\right) |0\rangle + \left[ \cos(\gamma) \cos(\varphi) \sin\left(\frac{S}{2R}\right) - \sin(\gamma) \sin(\varphi) \sin\left(\frac{S}{2R}\right) + i \left( \sin(\gamma) \sin\left(\frac{S}{2R}\right) \cos(\varphi) + \cos(\gamma) \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin\left(\frac{S}{2R}\right) \right) \right] |1\rangle \right]$$

Para  $\gamma = \pi$  (fig. IV.1. b): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\frac{\pi}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 11. a})$$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\frac{\pi}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle - i \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 11. b})$$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\frac{\pi}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 11. c})$$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\frac{\pi}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle + i \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 11. d})$$

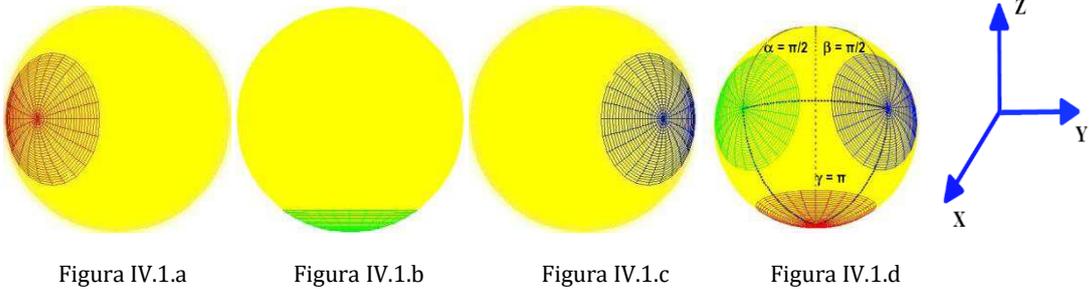


Figura IV.14: Configuração hipotética ( $\alpha, \beta, \gamma$ )

## 4.4.2 Linear I

Neste exemplo, para uma molécula com configuração ideal, todos os qubits em um mesmo *paralelo* ( $\alpha; \beta; -\beta$ ), temos como estados possíveis, ou caminhos possíveis, as amplitudes das eqs. (III-27, III-29, III-31), dados pela (Tab. III.1 - R=1),

Segundo o procedimento anterior, temos:

Para  $\alpha = \frac{\pi}{2}$  (fig. IV.2. b): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = \left[ \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i \left(\frac{1}{2}\right) \right] |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 12. a})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle - i \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 12. b})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = -\left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{1}{2}\right)\right] |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 12. c})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = -\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 12. d})$$

Para  $\beta = \frac{\pi}{2}$  (fig. IV. 2. c): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{\pi}{2}} = -\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 13. a})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{\pi}{2}} = \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 13. b})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{\pi}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 13. c})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{\pi}{2}} = \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 13. d})$$

Para  $\beta = \frac{-\pi}{2}$  (fig. IV. 2. a): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{-\pi}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 14. a})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{-\pi}{2}} = \left[-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) + i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 14. b})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{-\pi}{2}} = -\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |0\rangle - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 14. c})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{-\pi}{2}} = \left[-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - i\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right] |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 14. d})$$

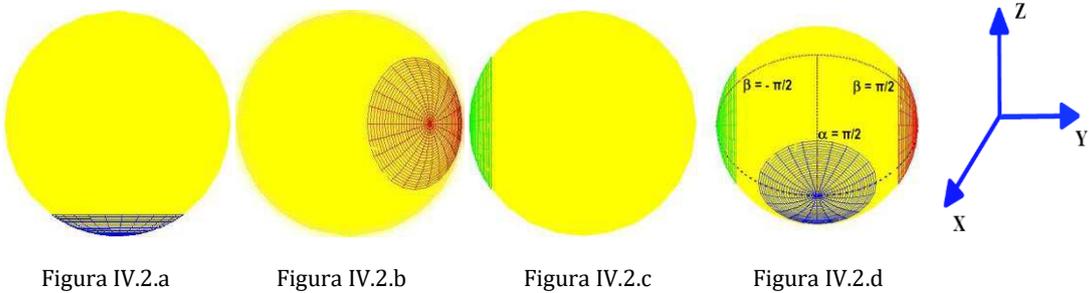


Figura IV.2.a

Figura IV.2.b

Figura IV.2.c

Figura IV.2.d

Figura IV.2: Configuração hipotética ( $\alpha, \beta, -\beta$ ), respectivamente.

### 4.4.3 Linear II

Neste exemplo, para uma molécula com configuração ideal, todos os qubits em um mesmo *paralelo* ( $\alpha; -\alpha; \beta$ ) temos como estados possíveis, ou caminhos possíveis, as amplitudes das eqs. (III-27, III-29, III-31), dados pela (Tab. III.1 - R=1), seguindo com o mesmo procedimento, temos:

Para  $\alpha = \frac{\pi}{2}$  (*fig. IV. 3. a*): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) - i \left( \frac{1}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 15. a})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle - i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 15. b})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = - \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) + i \left( \frac{1}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 15. c})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = - \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle - i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 15. d})$$

Para  $\alpha = \frac{-\pi}{2}$  (*fig. IV. 3. c*): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=-\pi/2} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) + i \left( \frac{1}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 16. a})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=-\pi/2} = - \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle + i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 16. b})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=-\pi/2} = \left[ - \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) + i \left( \frac{1}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 16. c})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=-\pi/2} = \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle + i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 16. d})$$

Para  $\beta = \frac{\pi}{2}$  (*fig. IV. 3. b*): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = - \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle + \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 17. a})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) + i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 17. b})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\pi/2} = \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |0\rangle + \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 17. c})$$

$$|\psi\rangle_{Y;\beta=\frac{\pi}{2}} = \left[ \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) - i \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \right] |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R = 1 \quad (\text{IV. 17. d})$$

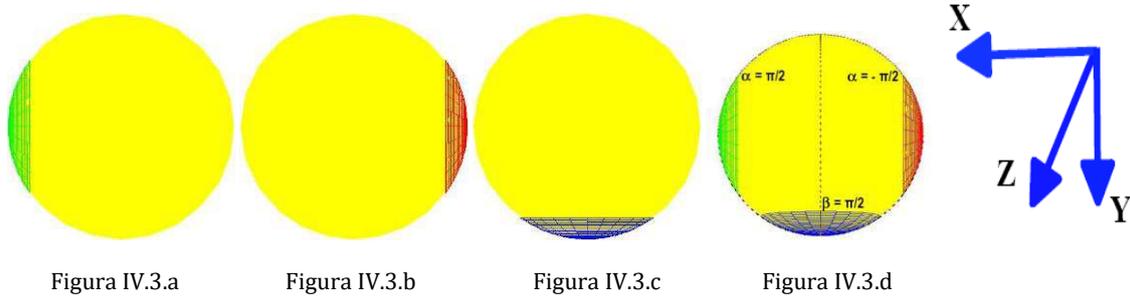


Figura IV.3: Configuração hipotética  $(\alpha, -\alpha, \beta)$ , respectivamente.

## 4.5 Os fulerenos

Dependendo das condições do procedimento de síntese, os elementos podem existir sob várias formas, chamadas de *alótropos*. Assim, o carbono elementar pode se arranjar em mais de 40 configurações, cuja maior parte é amorfa (isto é, não-cristalina). Como exemplo citamos o resíduo sólido da destilação do petróleo bruto e o carvão. Além disso, todos conhecem a fuligem gerada na combustão incompleta de materiais orgânicos. O *negro de fumo* é um produto comercial importante, sintetizado pelo aquecimento de hidrocarbonetos gasosos a quase 1000°C na ausência de ar, e que tem muitos usos, inclusive na tinta de impressão. O *carbono ativado* é muito poroso e capaz de absorver traços de matérias orgânicas do ar (em purificadores de ar e máscaras de gás) e da água (em filtros de água).

São conhecidas duas modificações cristalinas do carbono, a *grafita* e o *diamante*. A grafita, o mais estável dos alótropos de carbono, é um sistema  $\pi$  benzenóide policíclico completamente fundido, composto por folhas paralelas separadas por 3,35Å e arrumadas em um padrão semelhante ao de uma colméia aberta. A natureza completamente deslocalizada destas folhas (todos os carbonos têm hibridização  $sp^2$ ) dá origem à cor preta e a capacidade de condução elétrica. A propriedade lubrificante da grafita é o resultado do deslizamento fácil das folhas umas contra as outras. O “grafite” dos lápis é carbono grafítico (*fig.IV.4*), e as marcas negras deixadas pelo lápis em uma folha de papel são formadas por folhas do elemento que foram arrastadas pelo atrito [12, 13].

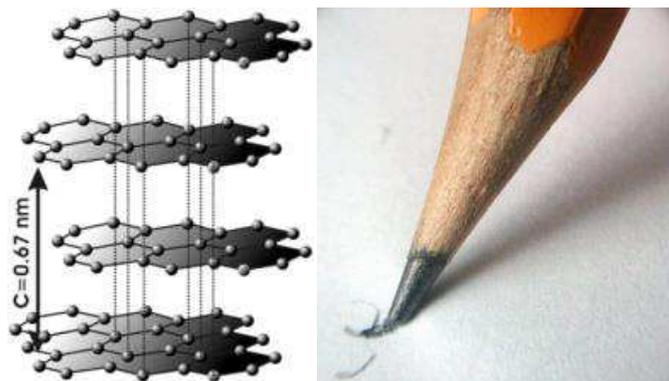


Figura IV.4: Estrutura da grafita, e o grafite dos lápis

No diamante, que é incolor, os átomos de carbono (com hibridização  $sp^3$ ) formam uma rede isolante de confôrmeros, interligados como a cadeia do ciclohexano (*fig. IV.5*). O diamante é o material mais denso e duro (menos deformável) que se conhece. Também é menos estável do que a grafita em altas temperaturas [13].

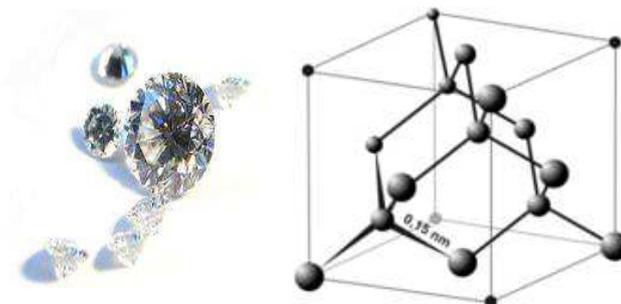


Figura IV.5: Diamantes e sua estrutura tridimensional.

Uma descoberta não esperada aconteceu em 1986 por Curl, Kroto e Smalley (prêmio Nobel - 1996): O  $C_{60}$ , um novo alótropo de carbono, de estrutura esférica, com a forma de uma bola de futebol. Eles descobriram que a evaporação da grafita com um feixe de *laser* gerava uma mistura de agregados de carbono em fase gasosa dos quais o mais abundante continha 60 átomos de carbono. A melhor forma de montar tal agregado satisfazendo à tetra valência do carbono é “enrolar” 20 anéis de benzeno fundidos de modo a ligar as valências livres para gerar 12 pentágonos, isto é, um sólido chamado de icosaedro truncado que tem 60 vértices equivalentes, exatamente como uma bola de futebol. O nome da molécula fullereno é uma homenagem a Buckminster Fuller, porque sua forma é semelhante aos “domos geodésicos” (*fig. IV.6*) desenhados por ele [29].



Figura IV.6: Estrutura com domos geodésicos [29]

A substância é solúvel em solventes orgânicos, o que ajudou muito a provar sua estrutura e a explorar sua química. O espectro de  $^{13}\text{C}$ -RMN, por exemplo tem uma única linha em  $\delta = 142,7 \text{ ppm}$  no intervalo esperado (*fig. IV. 7*).

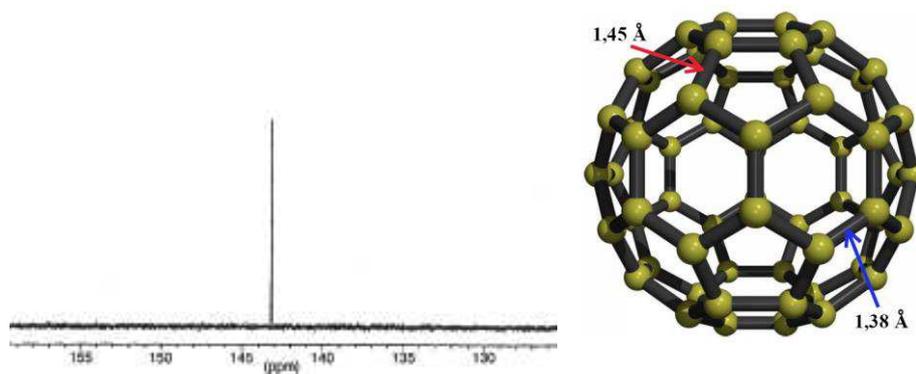


Figura IV.7: Espectro com a linha de RMN do  $\text{C}_{60}$  e sua estrutura tridimensional [30].

Devido à curvatura os anéis benzeno do  $\text{C}_{60}$  estão sob tensão, e seu conteúdo energético em relação à grafita é  $10,16 \text{ kcal.g}^{-1}$  por átomo de carbono [31]. Além disso, levou ao isolamento de muitos outros agregados de carbono maiores, apelidados de “fulerenos”, como o  $\text{C}_{70}$ , que têm a forma da bola de *rugby* (ovalada) (*fig. IV. 8*),

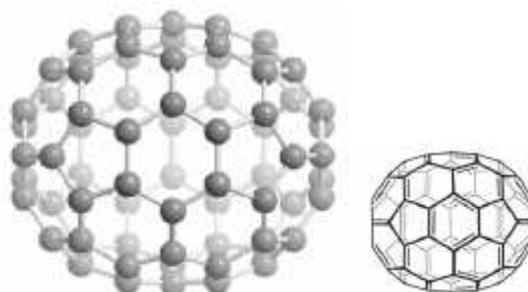


Figura IV.8: Estrutura -  $\text{C}_{70}$

de fulerenos que engaiolam átomos hóspedes, como He e núcleos de metal (“fulerenos endoédricos”) (*fig. IV.9*).

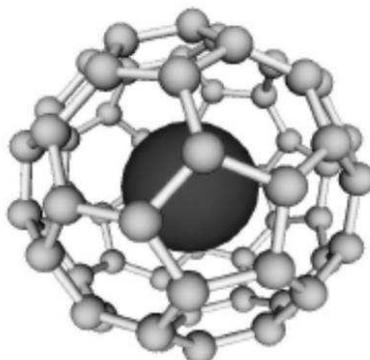


Figura IV.9: Fulereno - Engaiolamento

Os fulerenos são produzidos comumente na combustão incompleta da matéria orgânica sob certas condições e por vários tipos de tratamento térmico da fuligem, de modo que podem ser considerados “produtos naturais” de nosso planeta, desde os estágios iniciais de sua formação [13].

Uma das conseqüências mais interessantes das pesquisas sobre os fulerenos foi a identificação dos *nanotubos de carbono*.

Os nanotubos consistem de um ou mais tubos cilíndricos concêntricos formados de folhas de átomos de carbono com arranjo hexagonal, nos quais as extremidades podem estar fechadas por tampas assemelhadas a fulerenos e contendo seis anéis de cinco membros de átomos de carbono (*fig. IV.10*).

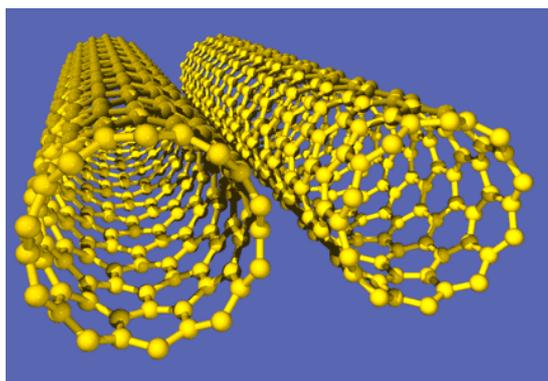


Figura IV.10: Nanotubos de Carbono

A preparação dos nanotubos tem estimulado muita pesquisa, e os compostos podem ter uma grande variedade de aplicações práticas tais como armazenagem de hidrogênio e catálise [32].

## 4.5.1 O modelo para o fulereno

O procedimento foi o mesmo utilizado para o algoritmo de Shor, essa molécula foi escolhida como um teste para o nosso modelo, por apresentar em seu espectro de RMN, uma única linha de ressonância ( $\delta = 142,63 \text{ ppm}$ ), indicando que, mesmo com 60 átomos de carbono, o fulereno apresenta um acoplamento  $J_{ij} = 0$ . Assim sendo, ao normalizarmos a frequência e efetuarmos a triangulação via o acoplamento, o que obtivemos, foi como era de se esperar, apenas um “desvio” em  $0x$ .

Logo, as 60 esferas de Bloch, representando os 60 qubits de um fulereno, possuem a mesma posição na esfera de Bodocongó (*fig.IV.11*). Como era esperado, já que possuem a mesma frequência de ressonância  $\nu_i$  e são desprovidos de acoplamento  $J_{ij}$ .

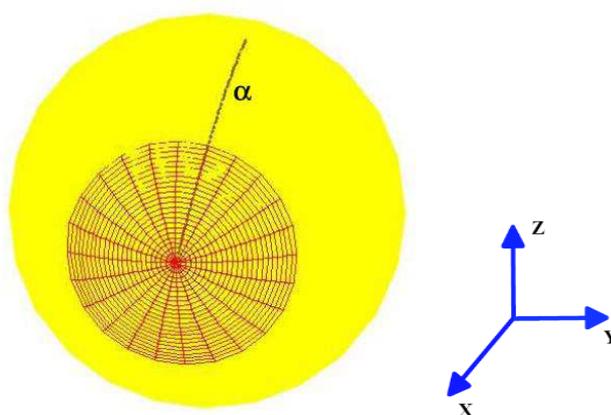


Figura IV.11: “Colapso” de todas as 60 esferas de Bloch em uma única posição.

## 4.6 Algoritmo de Shor

Todas as técnicas experimentais propostas até hoje falharam em implementar algoritmos quânticos. No entanto, a técnica de RMN é a que chegou mais longe em termos de processamento de informação quântica [33, 37]. Desde que Richard Feymann *profetizou* o surgimento da computação quântica, não houve muitos avanços na área até 1994. Foi quando surgiu o exemplo mais famoso de um algoritmo quântico, formulado por Peter W. Shor, dos laboratórios Bell [1], para determinar rapidamente os fatores primos de um número inteiro, usando um computador quântico. Para fatorar grandes números em um computador clássico, os melhores algoritmos até então conhecidos, exigem recursos que crescem exponencialmente. Por exemplo, um número com 500 dígitos exige 100 milhões de vezes mais passos de processamento computacional do que um número de 250 dígitos. O custo de processamento do algoritmo de Shor cresce polinomialmente, ou seja, um número de 500 dígitos exige apenas oito vezes mais passos que um número de 250 dígitos [2, 3].

O algoritmo de Shor é um marco da computação quântica porque ele foi o primeiro algoritmo a utilizar as funcionalidades particulares de um computador quântico para otimizar a solução de um problema. A publicação do algoritmo de Shor desencadeou uma avalanche de novas pesquisas e experiências na computação quântica. Em 2001 um grupo de Pesquisas da IBM, Vandersypen et al, conseguiram construir um computador quântico de 7 qubits via RMN [38]. Nesse computador foi implementado o algoritmo Shor, que conseguiu realizar corretamente a fatoração do número 15 ( $15 = 3 \cdot 5$ ). A importância desse experimento é que ele comprova a possibilidade real da computação quântica [39, 44]. As principais dificuldades enfrentadas nesse primeiro momento foram mais de cunho tecnológico do que teórico [3, 18, 19].

O computador quântico da IBM foi implementado através de uma molécula ( $C_{11}H_5F_5O_2Fe$ ) com 7 spins: os núcleos da molécula são constituídos por 5 núcleos de flúor e 2 núcleos de carbono conforme ilustra a (fig. IV. 12).

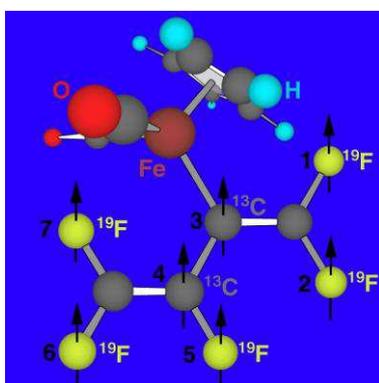


Figura IV.12: Computador Quântico da IBM - ( $C_{11}H_5F_5O_2Fe$ )

A programação do computador quântico é feita através de pulsos de rádio-freqüência. A leitura dos resultados é implementada via ressonância magnética nuclear (RMN), a mesma tecnologia usada nos aparelhos de tomografia computadorizada.

$i$	$\omega_i / 2\pi$	$T_{1,i}$	$T_{2,i}$	$J_{7i}$	$J_{6i}$	$J_{5i}$	$J_{4i}$	$J_{3i}$	$J_{2i}$
1	-22052.0	5.0	1.3	-221.0	37.7	6.6	-114.3	14.5	25.16
2	489.5	13.7	1.8	18.6	-3.9	2.5	79.9	3.9	
3	25088.3	3.0	2.5	1.0	-13.5	41.6	12.9		
4	-4918.7	10.0	1.7	54.1	-5.7	2.1			
5	15186.6	2.8	1.8	19.4	59.5				
6	-4519.1	45.4	2.0	68.9					
7	4244.3	31.6	2.0						

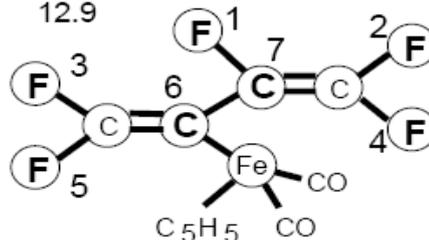


Figura IV.13: Tabela com os dados de RMN do ( $C_{11}H_5F_5O_2Fe$ ) [38].

## 4.6.1 O modelo para “Shor”

O procedimento adotado nesta seção, foi utilizar os dados experimentais da molécula ( $C_{11}H_5F_5O_2Fe$ ), usada na implementação do algoritmo de Shor via RMN (*fig. IV. 13*), para testar o nosso modelo.

O primeiro passo foi a normalização das frequências de ressonância de cada um dos sete qubits, em seguida, foi usada uma triangulação, para obtermos os valores de “desvio”,  $\delta'_i$ , via os acoplamentos  $J_{ij}$ . Os resultados obtidos para essa molécula foram

$\nu_1$	$\nu_2$	$\nu_3$	$\nu_4$	$\nu_5$	$\nu_6$	$\nu_7$
$-1.758\pi$	$0.039\pi$	$2.000\pi$	$-0.392\pi$	$1.210\pi$	$-0.360\pi$	$0.338\pi$

Tabela IV.1: Frequências de ressonâncias normalizadas.

$\delta'_1$	$\delta'_2$	$\delta'_3$	$\delta'_4$	$\delta'_5$	$\delta'_6$	$\delta'_7$
$0.187\pi$	$-0.923\pi$	$-0.451\pi$	$0.745\pi$	$0.617\pi$	$-0.502\pi$	$0.535\pi$

Tabela IV.2: “Desvios”  $\delta'_i$  normalizados.

Com isso, temos a localização dos qubits (esferas de Bloch) na esfera de Bodocongó (*fig. IV. 14*),

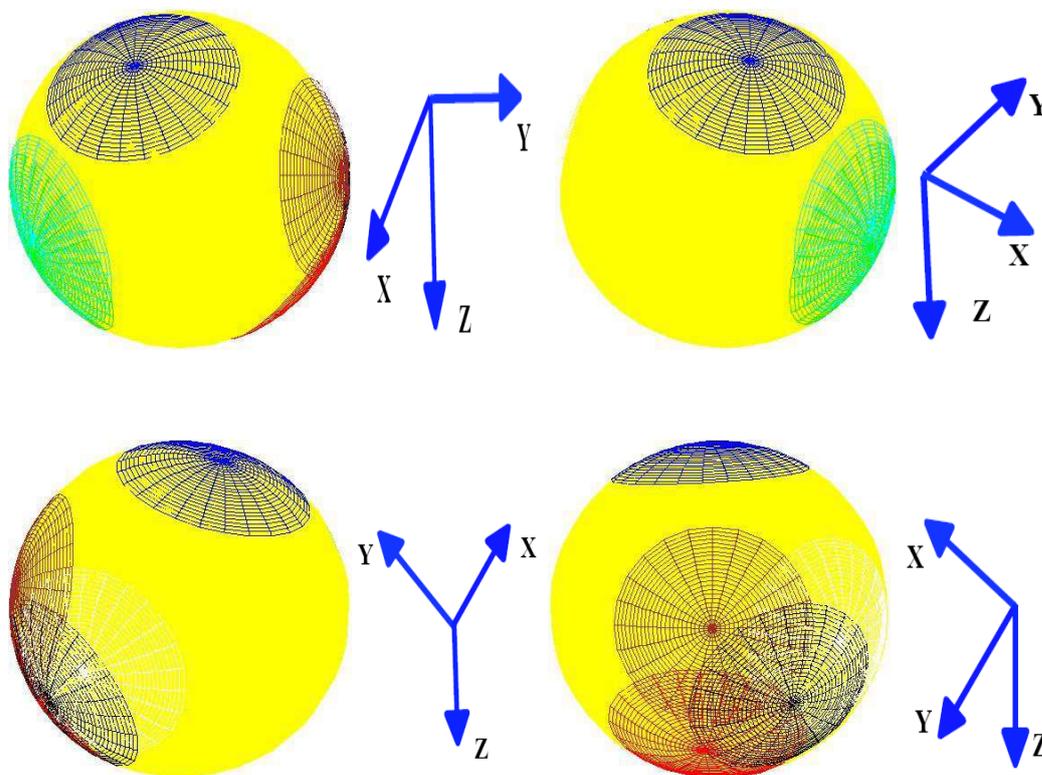


Figura IV.14: Visualizações da configuração do computador da IBM.

lembramos ainda que, a localização de cada qubit está associada ao tipo de informação intrínseca que cada um possui, individualmente e coletivamente, já que estão todos acoplados e com isso, trocando informações entre si.

Tal procedimento possibilita, prepararmos os nossos estados quânticos seguindo a descrição do sistema, ou seja, levando em consideração o “fingerprint” de cada qubit, através de suas frequências de ressonância e, como estes se comunicam, através do acoplamento  $J_{ij}$ .

As operações envolvidas na esfera de Bodocongó, são as operações de rotação, como no caso da esfera de Bloch. Mas por se tratar de um sistema composto, a interpretação para tais operações, é uma “rotação rígida”, ou seja, ao rotacionarmos um estado, estaremos rotacionando todos os outros possíveis (por isso foi usado uma sequência com mais de 300 pulsos na implementação do algoritmo de Shor [3, 38]).

## 4.7 “Descoerência geométrica” – Análise da curvatura

Um conceito muito importante, e que tem sido estudado bastante nos últimos anos, é o de descoerência, o ruído quântico. Isto é todo e qualquer processo que venha a corromper a evolução esperada do sistema.

Como foi visto no *CAP.II*, o *FID* é o decaimento exponencial da magnetização. Uma das causas desse fenômeno é a inomogeneidade do campo magnético estático (o campo externo), responsável pelo fenômeno de precessão dos spins que, em uma parte da amostra fica fora de fase com a de spins de outra parte.

Efeitos devidos à inomogeneidade são, em princípio, reversíveis, um outro fator é a energia térmica dos spins para o equilíbrio com sua vizinhança, um processo que por sua vez, envolve troca de energia [2].

Considere agora um sistema (*o primeiro caso*) isolado, representado por um estado quântico puro, que passa a interagir com um ambiente muito maior do que o próprio sistema mas, no todo, ainda permanecendo como um sistema isolado (*sistema + ambiente*). Quando teremos o colapso do sistema? Como já foi dito antes, o nosso modelo afirma que a esfera de Bodocongó (*ambiente*) é o lugar em que todas as esferas de Bloch (*sistema*) interagem e sentem os seus efeitos.

Por exemplo, no limite de  $R \rightarrow \infty$  em que a esfera de Bodocongó se torna muito maior que as esferas de Bloch, temos,

Para  $\alpha = \frac{\pi}{2}$  (*fig.IV.15.a*): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = -i|1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV.18.a})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = -i|1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 18. b})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = -i|1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 18. c})$$

$$|\psi\rangle_{X;\alpha=\pi/2} = -i|1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 18. d})$$

Para  $\beta = \frac{\pi}{2}$  (fig. IV. 15. c): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{X;\beta=\pi/2} = |1\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 19. a})$$

$$|\psi\rangle_{X;\beta=\pi/2} = |1\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 19. b})$$

$$|\psi\rangle_{X;\beta=\pi/2} = |1\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 19. c})$$

$$|\psi\rangle_{X;\beta=\pi/2} = |1\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 19. d})$$

Para  $\gamma = \pi$  (fig. IV. 15. b): os estados acessíveis são

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\pi/2} = |0\rangle; \varphi = 0; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 20. a})$$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\pi/2} = |0\rangle; \varphi = \frac{\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 20. b})$$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\pi/2} = |0\rangle; \varphi = \pi; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 20. c})$$

$$|\psi\rangle_{Z;\gamma=\pi/2} = |0\rangle; \varphi = \frac{3\pi}{2}; s = \frac{\pi}{2}; R \rightarrow \infty \quad (\text{IV. 20. d})$$

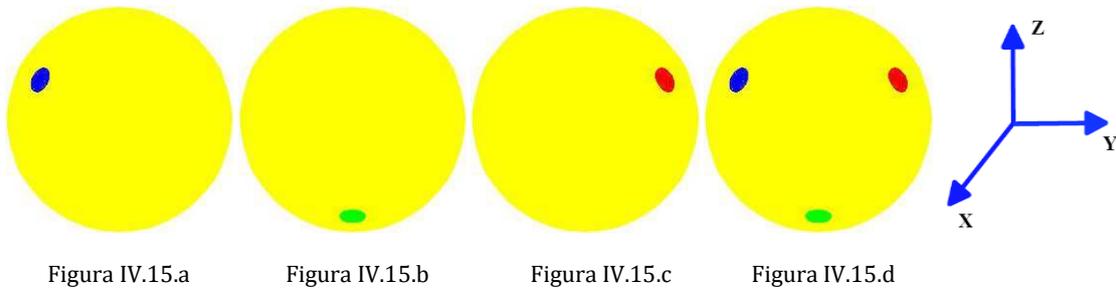


Figura IV.15: Configuração hipotética ( $\alpha, \beta, \gamma$ )  $R \rightarrow \infty$ , respectivamente.

Temos uma diminuição dos estados possíveis, dos caminhos possíveis! Mesmo na ausência de qualquer tipo de medição. O sistema sofreu o que denominamos de

“descoerência geométrica”, ou seja, o sistema inicial perdeu informação pelo simples fato da curvatura do ambiente, a esfera de Bodocongó, ter diminuído.

Vemos que a quantidade de estados acessíveis diminui, “desaparece” com a diminuição da curvatura. Saímos da condição inicial ( $R = 1$ ) e evoluímos para uma configuração em que o ambiente é infinitamente maior do que o sistema, ou seja,  $R \rightarrow \infty$ .

Como foi dito antes, toda informação está contida na superfície, logo, era de se esperar qualquer mudança sofrida, no nosso caso, a mudança foi a diminuição da curvatura, influenciado no resto do sistema, como foi mostrado.

# Capítulo V

## 5 Conclusões e Perspectivas

---

Após estudarmos o modelo para um qubit via esfera de Bloch, fizemos uma reparametrização pelo comprimento de arco, afetando assim o espaço projetivo  $\mathbb{C}^2$ , a esfera de Bloch, que é o espaço de estados de  $spin\frac{1}{2}$ , onde se dão todas as operações de manipulação através da implementação da computação quântica via RMN, com o uso de operadores unitários de rotação, as portas lógicas.

Mostramos que a posição de cada qubit (esfera de Bloch) na esfera de Bodocongó, implica em como cada computador quântico (molécula) está configurado, ou seja, a cada novo conjunto de posições, haverá uma configuração diferente para o computador quântico.

Mostramos a possibilidade de configurarmos computadores quânticos através do campo estático  $\mathbf{B}_0$ , o campo externo através da interação Zeeman, é quem irá determinar tal configuração, pois as frequências de ressonância dos qubits ( $\nu_i$ ) dependem do campo  $\mathbf{B}_0$ . Logo, com a mudança do campo  $\mathbf{B}_0$ , teremos novas posições na esfera de Bodocongó e conseqüentemente uma nova configuração para o computador quântico.

Conseguimos mostrar a relação entre a informação contida em um sistema de spins acoplados com a curvatura do espaço ao qual o espaço de Hilbert projetivo  $\mathbb{C}^2$ , está imerso. Onde vimos que, no caso em que a curvatura é positiva  $\kappa = \frac{1}{R^2}$ , e igual a  $\kappa = 1$ , ou seja para  $R = 1$ , teremos todos os estados de superposição possíveis, enquanto no caso em que  $\kappa = 0$ , ou seja,  $R \rightarrow \infty$ , nem todos os estados superpostos são mais possíveis, surgindo o que denominamos de “*descoerência geométrica*”, evidenciando a relação entre a informação contida no sistema, as esferas de Bloch, com a curvatura do ambiente, a esfera de Bodocongó.

Portanto, o principal resultado deste trabalho é que o modelo proposto foi capaz de representar e configurar um computador quântico, com  $n - qubits$  na esfera de Bodocongó, através do campo estático  $\mathbf{B}_0$ , como também programá-lo através do campo oscilante de  $R.F.$

Acreditamos que será possível aumentar o leque de aplicabilidade do modelo, para sistemas como:

- i) Portas geométricas para sistemas compostos;
- ii) O confinamento dos quarks;
- iii) O paradoxo da informação – bits, qubits e buracos negros;

Pra tanto iremos considerar tais sistemas como qubits na esfera de Bodocongó. Em particular, estamos interessados em estudar os efeitos da curvatura do ambiente sobre o sistema.

# Apêndice I

## 6 Teorema de Gauss-Bonnet

---

### 6.1 Forma local do teorema de Gauss-Bonnet

Faremos uma breve introdução sobre o teorema de Gauss-Bonnet, com algumas aplicações, em especial para triangulações.

*Teorema de Gauss-Bonnet na versão local:* Sejam  $X: U \rightarrow S$  uma parametrização ortogonal de uma superfície orientada  $S$ , onde  $U \subset \mathbb{R}^2$  é homeomorfo a um disco aberto e  $x$  é compatível com a orientação de  $S$ . Seja  $R \subset X(U)$  uma região simples de  $S$  e seja  $\alpha: I \rightarrow S$  tal que  $\partial R = \alpha(I)$ . Suponha que  $\alpha$  é orientada positivamente, parametrizada pelo comprimento de arco  $s$ , e sejam  $\alpha(s_0), \dots, \alpha(s_k)$  e  $\theta_0, \dots, \theta_k$ , respectivamente, os vértices e os ângulos externos de  $\alpha$  [5]. Então

$$\sum_{i=0}^k \int_{s_i}^{s_{i+1}} k_g(s) ds + \iint_R K d\sigma + \sum_{i=0}^k \theta_i = 2\pi \quad (\text{A I.1})$$

onde  $k_g(s)$  é a curvatura geodésica dos arcos regulares de  $\alpha$  e  $K$  é a curvatura Gaussiana de  $S$ .

### 6.2 Forma global do teorema de Gauss-Bonnet

Vejamos agora alguns aspectos topológicos que serão usados para a versão global do teorema de Gauss-Bonnet. Iniciaremos com algumas definições.

Seja  $R$  uma região da superfície regular  $S$ . Chamaremos  $R$  de região regular se  $R$  for compacta e sua fronteira  $\partial R$  for a união de um número finito de curvas regulares por partes, fechadas e simples que não se intersectam.



Figura A I.1.a: Região regular

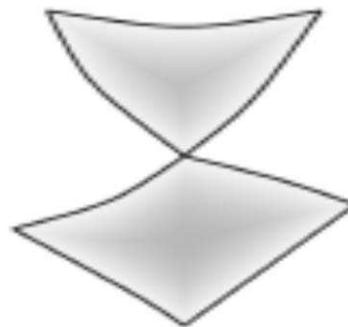


Figura A I.1.b: Região não regular

Uma região simples com apenas três vértices com ângulos externos  $\alpha_i \neq 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ , é um *triângulo*.

Uma *triangulação* de uma região regular  $R \subset S$  é uma família finita  $\Lambda$  de triângulos  $T_i$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, n$ , tal que

- i)  $U_{i=1}^n T_i = R$ .
- ii) Se  $T_i \cap T_j = \emptyset$ ,  $i \neq j$ , então  $T_i \cap T_j$  é uma aresta comum de  $T_i$  e  $T_j$  ou um vértice de  $T_i$  e de  $T_j$ .

A partir destas definições e tomando uma triangulação  $\Lambda$  de uma região regular  $R \subset S$ , denotaremos por  $\chi(R)$  a *característica de Euler-Poincaré* da triangulação, e esta será dada por

$$\chi(R) = F - A + V \tag{A I.2}$$

onde  $F$  é o número de triângulos,  $A$  é o número de lados (arestas) e  $V$  é o número de vértices da triangulação  $\Lambda$ .

Numa superfície regular, cada região regular admite uma triangulação.

Sejam  $S$  uma superfície orientada e  $\{X\alpha\}$ ,  $\alpha \in A$ , uma família de parametrizações compatíveis com a orientação de  $S$ . Seja  $R \subset S$  uma região regular. Então existe uma triangulação  $\Lambda$  de  $R$ , onde cada triângulo  $T_i \in \Lambda$  está contido em alguma vizinhança coordenada da família  $\{X\alpha\}$ . Além disso, triângulos adjacentes determinam orientações opostas em lados comuns, desde que a fronteira de cada triângulo esteja orientada positivamente (Fig. A I.2.a).

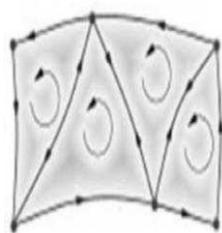


Figura A I.2.a: Triangulação orientada

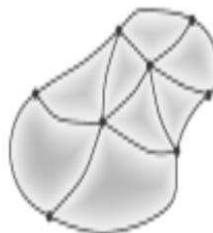


Figura A I.2.b: Triangulação



Figura A I.2.c: Não-Triangulação

A característica de Euler-Poincaré  $\chi(R)$  não depende da triangulação da região regular da superfície  $S$ . Daí, vemos que a característica é um invariante topológico.

A característica de Euler-Poincaré de uma superfície compacta e conexa  $S \subset \mathbb{R}^3$  assume um dos seguintes valores:  $2, 0, -2, \dots, -2n$ . Além disso, se  $S' \subset \mathbb{R}^3$ , compacta e conexa, tem  $\chi(S') = \chi(S)$  então  $S'$  e  $S$  são homeomorfas.

Em outras palavras, toda superfície compacta e conexa  $S \subset \mathbb{R}^3$  é homeomorfa a uma esfera com um número  $g$  de alças. O número

$$g = \frac{2 - \chi(S)}{2} \quad (\text{A I. 3})$$

é chamado o gênero de  $S$ .

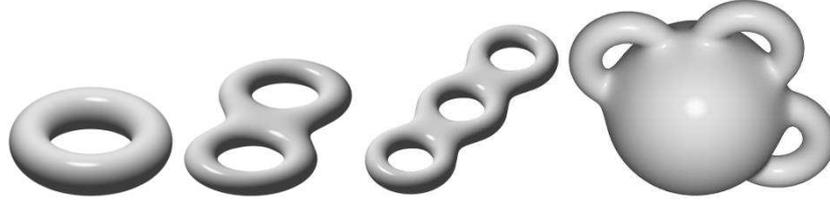


Figura A I.3.a: Figura A I.3.b: Figura A I.3.c: Figura A I.3.d:  
 Figura A I.3: (a) O Toro; (b) O 2-Toro; (c) O 3-Toro; (d) A esfera com três asas  $\chi = -4$

*Teorema de Gauss-Bonnet na versão global:* Seja  $R \subset S$  uma região regular de uma superfície orientada e sejam  $C_1, \dots, C_n$ , as curvas fechadas, simples e regulares por partes que formam a fronteira  $\partial R$  de  $R$ . Suponha que cada  $C_i$ , ( $i = 1, \dots, n$ ), é orientada positivamente e sejam  $\theta_1, \dots, \theta_p$ , o conjunto de ângulos externos das curvas  $C_1, \dots, C_n$ . Então

$$\sum_{i=1}^n \int_{C_i} k_g(s) ds + \iint_R K d\sigma + \sum_{i=1}^p \theta_i = 2\pi\chi(R) \quad (\text{A I. 4})$$

onde  $s$  denota o comprimento de arco de  $C_i$ , e a integral sobre  $C_i$  significa a soma das integrais em todos os arcos regulares de  $C_i$  [5].

## 6.3 Aplicação do teorema de Gauss-Bonnet

Iremos apresentar aqui, uma aplicação do teorema de Gauss-Bonnet.

Seja  $T$  um triângulo geodésico em uma superfície orientada, calcularemos a soma de seus ângulos internos. Sejam  $\theta_1, \theta_2$  e  $\theta_3$  os ângulos externos de  $T$  e,  $\phi_1 = \pi - \theta_1$ ,  $\phi_2 = \pi - \theta_2$  e  $\phi_3 = \pi - \theta_3$  os ângulos internos. Aplicando o teorema de Gauss-Bonnet em  $T$  temos

$$\sum_{i=0}^2 \int k_g ds + \iint_T K d\sigma + \sum_{i=1}^3 \theta_i = 2\pi \quad (\text{A I. 5})$$

Como sabemos a curvatura geodésica de uma geodésica é nula, então a equação acima se torna

$$\iint_T K d\sigma + \sum_{i=1}^3 \theta_i = 2\pi \quad (\text{A I. 6})$$

ou ainda,

$$\iint_T K d\sigma = 2\pi - \sum_{i=1}^3 \theta_i = 2\pi - \sum_{i=1}^3 (\pi - \varphi_i) = 2\pi - 3\pi + \sum_{i=1}^3 \varphi_i = -\pi \sum_{i=1}^3 \varphi_i \quad (\text{A I. 7})$$

Assim, a soma dos ângulos internos de um triângulo geodésico é dada por,

$$\sum_{i=1}^3 \varphi_i = \pi + \iint_T K d\sigma \quad (\text{A I. 8})$$

Daí, esta soma depende da curvatura da superfície em que este triângulo se encontra. Vejamos alguns exemplos:

i) Vamos considerar o triângulo sobre um plano. Assim  $K = 0$  e

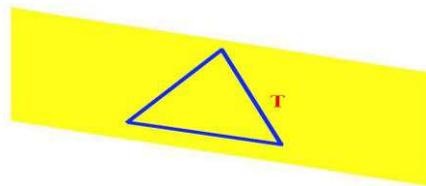


Figura A I.4: Triângulo plano

$$\sum_{i=1}^3 \varphi_i = \pi + \iint_T K d\sigma = \pi \quad (\text{A I. 9})$$

ii) Estando o triângulo numa esfera, então  $K > 0$ , logo

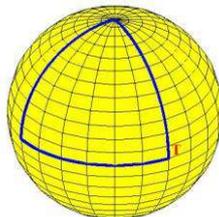


Figura A I.4: Triângulo esférico

$$\sum_{i=1}^3 \varphi_i = \pi + \iint_T K d\sigma > \pi. \quad (\text{A I. 10})$$

## 7 Referências

---

- [1] P. W. Shor. *Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer*. *SIAM J. SCI. STATIST. COMPUT.*, 26:1484, 1997.
- [2] Michael A. Nielsen, Isaac L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (New York, 2000).
- [3] Ivan Oliveira, Roberto Sarthour Jr., Tito Bonagamba, Eduardo Azevedo, Jair C. C. Freitas, *NMR Quantum Information Processing*, Elsevier Science; (Amsterdam, 2007).
- [4] Nilo Kühlkamp, *Introdução à Topologia Geral*, Ed. UFSC (Santa Catarina, 2002).
- [5] Manfredo P. do Carmo, *Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies*, SBM, (Rio de Janeiro, 2005).
- [6] Malcolm H. Levitt, *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, Wiley; 2 edition (England, 2008).
- [7] Richard R. Ernst, *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*, Oxford University Press (New York, 1990).
- [8] António M. d'A. R. Gonsalves e Teresa M. V. D. Pinho e Melo, *Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear*, Imprensa da Universidade de Coimbra (Coimbra, 2007).
- [9] Horst Friebolin, *Basic One and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, Wiley-VCH (Germany, 2005).
- [10] Peter Atkins and Julio de Paula, *Physical Chemistry*, 8<sup>th</sup> Edition, Oxford University Press (New York, 2008).
- [11] Brian Cowan, *Nuclear Magnetic Resonance and Relaxation*, Cambridge University Press (New York, 2005).
- [12] D. F. Shriver e P. W. Atkins, *Inorganic Chemistry*, Fourth Edition, Oxford University Press (New York, 2006).

- [13] K. Peter C. Vollhardt e Neil E. Schore, *Organic Chemistry: Structure and Function*, 4.Ed., W.H. Freeman New York, 2002).
- [14] Albert W. M. Lee, *An analogy of the NMR Effect*, J. CHEM. EDU. VOL. 62 NUMBER 4 APRIL 1985.
- [15] C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, 3a . Ed., Springer-Verlag (Berlin, 1990).
- [16] V. M. S. Gil e C. F. G. C. Geraldês, *Ressonância Magnética: Fundamentos, Métodos e Aplicações*, 2ª. Ed., Fundação Calouste Gulbenkian (Lisboa, 2002).
- [17] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, 2a. Ed., Springer-Verlag (Berlin, 1994).
- [18] D. Rugar, R. Budaklan, H.J. Mamin and B.W. Chui, *Single spin detection by magnetic resonance force microscopy*, Letters to Nature, 430 (2004) 329.
- [19] J. Kohler, J.A.J.M. Disselhorst, M.C.J.M. Donckers, E.J.J. Groenen, J. Schmidt and W.E. Moerner, *Magnetic resonance of a single molecular spin*, Letters to Nature, 363 (1993) 242.
- [20] Herbert Busemann, *The geometry of geodesics*, Dover (New York, 2005).
- [21] George A. Jennings, *Modern Geometry*, (Spinger-Verlag, 1994).
- [22] C. Misner, K. Thorne e J. Wheeler, *Gravitation*, (Freeman, 1973).
- [23] Sean Carrol, *Spacetime and Geometry: An Introduction to General Relativity*, Addison Wesley (San Francisco, 2004).
- [24] Jonh Stillwell, *Geometry of Surfaces*, (Spinger-Verlag, 1992).
- [25] P. Burkand and G. F. Steinke, *Geometries on Surfaces*, (Cambridge, 2001).
- [26] Anton Howard e Chris Rorres, *Elementary Linear Algebra: Applications Version*, John Wiley & Sons, Inc. (England, 2000).
- [27] J. Gomes e L. Velho, *Fundamentos da computação gráfica*, IMPA (Rio de Janeiro, 2003).
- [28] Simon L. Altmann, *Rotations, Quaternions, and Double Groups*, Dover (New York, 2005).
- [29] Magnus J. WEnninger, *Spherical Models*, Dover (New York, 1999).

- [30] H. Ajie, M. M. Alvarez, S. J. Anz, R. D. Beck, F. Diederich, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, W. Krätschmer, Y. Rubin, K. E. Shriver, D. Sensharma, R. L. Whetten, *J. Phys. Chem.* 1990, *94*, 8630.
- [31] Peidong Yang, *Chemistry of Nanostructured Materials*, World Scientific, (London, 2003).
- [32] Andreas Hirsch e Michael Brettreich, *Fullerenes: Chemistry and Reactions*, WILEY-VCH Verlag, (Germany, 2005).
- [33] J.A. Jones and M. Mosca, *Implementation of a quantum algorithm on a nuclear magnetic resonance quantum computer*, *J. Chem. Phys.*, 109, (1998) 1648.
- [34] O.Mangold, A. Heidebrecht and M.Mehring, *NMR tomography of the three-qubit Deutsch-Josza algorithm*, *Phys. Rev. A* 70 (2004) 042307.
- [35] J.A. Jones, M. Mosca and R.H. Hansen, *Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer*, *Nature* 393 (1998) 344.
- [36] L. Xiao and J.A. Jones, *Error tolerance in an NMR implementation of Grover's fixedpoint quantum search algorithm*, *Phys. Rev. A* 72, (2005) 032326.
- [37] M.S. Anwar, D. Blazina, H.A. Carteret, S.B. Duckett and J.A. Jones, *Implementing Grover's quantum search on a para-hydrogen based pure state NMR quantum computer*, *Chem. Phys. Lett.*, 400, (2004) 94.
- [38] L.M.K. Vandersypen, M. Steffan, G. Breyta, C.S. Yannoni, M.H. Sherwood and I.L.Chuang, *Experimental realization of Shor's quantum factorin algorithm using nuclear magnetic resonance*, *Nature*, 414, (2001) 883.
- [39] L.M.K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C.S. Yannoni, R. Cleve and I.L. Chuang, *Experimental realization of an order-finding algorithm with an NMR quantum computer*, *Phys. Rev. Lett.* 85, (2000) 5452.
- [40] K.V.R.M. Murali, N. Sinha, T.S. Mahesh, M.H. Levitt, K.V. Ramanatham and A. Kumar, *Quantum-information processing by nuclear magnetic resonance: experimental implementation of half-adder and subtractor operations using an oriented spin-7/2 system*, *Phys. Rev. A* 66, (2002) 022313.
- [41] W.S. Warren, *The usefulness of NMR quantum computing*, *Science* 277 (1997) 1688.

- [42] M.A. Nielsen, E. Knill, and R. Laflamme, *Complete quantum teleportation using nuclear magnetic resonance*, Nature, 396 (1998) 52.
- [43] X. Fang, X. Zhu, M. Feng, X. Mao and F. Du, *Experimental implementation of dense coding using nuclear magnetic resonance*, Phys. Rev. A, 61 (2000) 022307-1.
- [44] N. Boulant, E.M. Fortunato, M.A. Pravia, G. Teklemariam, D.G. Cory and T.F. Havel, *Entanglement transfer experiment in NMR quantum information processing*, Phys. Rev. A, 65 (2002) 024302-1.
- [45] U. Muller, *Inorganic Structural Chemistry*, Wiley; 2 edition (England, 2006).
- [46] M. V. Berry, *Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes*, Proc. Roy. Soc. Lond. A392, 45 (1984).
- [47] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, 2a. Ed. (New York, 2005).
- [48] J.F. Zwanziger, M. Koenig, and A. Pines, *Berrys Phase*, Annu. Rev. Phys. Chem. 1990. 41: 601-46.
- [49] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley, (San Francisco, 1993).
- [50] D. Suter, G.C. Chingas, R.A. Harris, *Berry's phase in magnetic resonance*, publicado em *Geometric Phases in Physics (Advanced Series in Mathematical Physics, Vol 5)*, A. Shapere, F. Wilczek, World Scientific, (London, 1988).