



UNIVERSIDADE FEDERAL DO OESTE DA BAHIA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DAS TECNOLOGIAS CURSO DE
BACHARELADO EM FÍSICA

Jhérssica Neves de Freitas

Estudo das propriedades magnéticas de sistemas
unimoleculares usando computação quântica

Barreiras, Bahia

18 de Setembro de 2023

Jhérssica Neves de Freitas

Estudo das propriedades magnéticas de sistemas unimoleculares usando computação quântica

Monografia apresentado ao curso de bacharelado em Física, como requisito para a aprovação na componente curricular CET0318-Trabalho de Conclusão de Curso III e obtenção do título de bacharel em Física, pelo o Centro de Ciências Exatas e das Tecnologias da Universidade Federal do Oeste da Bahia.

Universidade Federal do Oeste da Bahia
Centro de Ciências Exatas e das Tecnologias
Curso de Bacharelado em Física

Orientador: Dr. Clebson dos Santos Cruz

Barreiras, Bahia
18 de Setembro de 2023

FICHA CATALOGRÁFICA

F866 Freitas, Jhérssica Neves de.

Estudo das propriedades magnéticas de sistemas unimoleculares usando a computação quântica. / Jhérssica Neves de Freitas. – 2023.

44f.

Orientador: Prof. Dr. Clebson dos Santos Cruz.

Monografia (Graduação) – Bacharelado em Física. Universidade Federal do Oeste da Bahia. Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias. Barreiras, BA, 2023.

1. Mecânica quântica. 2. IBM QE. 3. Computação quântica. 4. Precessão de Larmor. I. Cruz, Clebson dos Santos. II. Universidade Federal do Oeste da Bahia - Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias. III. Título.

CDD 530

Biblioteca Universitária de Barreiras - UFOB

Jhérssica Neves de Freitas

Estudo das propriedades magnéticas de sistemas unimoleculares usando computação quântica

Monografia apresentado ao curso de bacharelado em Física, como requisito para a aprovação na componente curricular CET0318-Trabalho de Conclusão de Curso III e obtenção do título de bacharel em Física, pelo o Centro de Ciências Exatas e das Tecnologias da Universidade Federal do Oeste da Bahia.

Trabalho aprovado. Barreiras, Bahia, 22 de Setembro de 2023.

Dr. Clebson dos Santos Cruz

Orientador

Dr. Antônio César do Prado Rosa Júnior

Convidado 1

Dr. Elias Brito Alves Júnior

Convidado 2

Barreiras, Bahia

22 de Setembro de 2023

Dedico a minha mãe e ao meu pai

Resumo

Os avanços tecnológicos abriram portas para o progresso em diversas áreas, incluindo a miniaturização de dispositivos eletrônicos. Isso exige uma compreensão da mecânica quântica, que pode viabilizar novas funcionalidades e aumentar a eficiência no desenvolvimento de novos aparelhos. A computação quântica oferece vantagens em comparação com os computadores clássicos, como uma capacidade de armazenamento superior e uma transferência de informações mais rápida. Neste contexto, nossos objetivos englobam a exploração das propriedades quânticas relevantes para a compreensão de sistemas unimoleculares, bem como a análise das características relacionadas à precessão de Larmor, com o propósito de simulá-los em um ambiente computacional quântico. Dessa forma, o presente trabalho se dedica à investigação da interação entre um único spin e um campo magnético constante, realizando uma simulação em um computador quântico da IBM QE. Os resultados obtidos são então comparados com as observações teóricas já existentes. Ainda que haja escassez de recursos de estudo sobre o tema, a utilização de softwares quânticos abre novas perspectivas para a pesquisa, destacando a importância da computação quântica no avanço das tecnologias emergentes.

Palavras - Chaves: Mecânica Quântica, IBM QE, Computação Quântica, Precessão de Larmor.

Sumário

1- INTRODUÇÃO	7
2 - DINÂMICA DO SPIN $\frac{1}{2}$	9
2.1- Spin $\frac{1}{2}$ e o experimento de Stern-Gerlach	9
2.2 - Postulados da mecânica quântica.....	11
2.3 - Operadores do Spin.....	13
2.4 - Evolução temporal e precessão do spin.....	16
3- INTRODUÇÃO A COMPUTAÇÃO QUÂNTICA.....	20
3.1- História da ciência da computação	20
3.2 - Computação quântica	21
3.3 - Simulações de sistemas quânticos.....	26
4- SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DE UM SPIN	28
4.1 – Operando um qbit na plataforma da IBM QE	28
4.2 – Medidas físicas em sistema de spin $\frac{1}{2}$	29
4.3 – Dinâmica de um spin em um computador quântico.....	30
5 - CONCLUSÃO.....	35
REFERÊNCIAS.....	36
Apêndice A – Algoritmo Quântico	40
A1 – Magnetização na direção z	40
A2 – Magnetização na direção x.....	41
A3 – Magnetização na direção y.....	42
A4 – Esquema do processador quântico	43
Apêndice B – Taxa de erro de leitura	44

1. INTRODUÇÃO

O avanço tecnológico das últimas décadas propiciou progressos em variados campos. A tendência à miniaturização de aparelhos tecnológicos tem sido um dos grandes motores da inovação em dispositivos eletrônicos ligados ao bem-estar da vida contemporânea como, por exemplo, a evolução dos computadores, que passaram de computadores gigantes para sistemas menores e mais otimizados, como os laptops e os smartphones.

Contudo, para miniaturizar tais dispositivos são necessárias uma compreensão aprofundada das leis da mecânica quântica. Os átomos e moléculas apresentam comportamentos muito diferentes em comparação com alguns dos sistemas macroscópicos que estamos familiarizados. Dessa forma, o emprego de partículas quânticas nos permite realizar funções inéditas com maior segurança e eficiência, favorecendo o desenvolvimento de novos dispositivos [1]. Dentro desse cenário, a computação quântica é percebida como uma solução eficiente para a criação de novas tecnologias. Ela se fundamenta no processamento de informações presentes em sistemas quânticos, apoiando-se nas teorias da física quântica [1].

Com os avanços da computação quântica, tarefas antes inacessíveis, agora são possíveis. Por exemplo, o desenvolvimento de computadores quânticos traz vantagens em relação aos computadores clássicos porque permite maior capacidade de armazenamento e, portanto, a capacidade de transmitir informações com mais rapidez [7]. Tal como, o algoritmo de teletransporte que permite transferir um estado quântico de uma partícula para outra, mesmo que estejam separados por grandes distâncias, e o algoritmo de Grover que é um algoritmo de busca quântica com uma melhoria quadrática em relação aos algoritmos clássicos [1,2]. Essa velocidade de processamento é possível porque os computadores quânticos operam através de bits quânticos, ou qubits. Um qubit é caracterizado pela superposição dos estados 0 e 1, ou seja, pode representar ambos simultaneamente, ao contrário do computador clássico que opera somente com 0 ou 1, limitando sua capacidade de processamento [24,29].

Apesar do crescente desenvolvimento da computação quântica nos últimos anos, ainda é necessário desenvolver softwares dedicados a computadores

quânticos. Atualmente, o surgimento de plataformas voltadas para a simulação quântica possibilitou que as pessoas tivessem um acesso rápido e prático desses softwares quânticos através de um computador pessoal, usando a computação em nuvem [2,12,14]. A IBM Quantum Experience (IBM QE) foi uma das primeiras plataformas a criar um computador quântico de acesso remoto para todos os públicos [2], onde é possível desenvolver e executar programas por meio dos aplicativos e sistemas quânticos. Os computadores da IBM QE são programados usando o Qiskit e os seus softwares de código aberto são baseados em Python, tornando-os mais eficientes [37].

Nesse contexto iremos explorar a plataforma da IBM QE, para o desenvolvimento de softwares quânticos de código aberto (open source), explorando novas perspectivas para o algoritmo de caracterização da dinâmica de spin para dispositivos spintrônicos. O nosso objetivo é estudar experimentalmente a dinâmica de sistemas com um único spin interagindo com campos magnéticos, como o fenômeno da precessão de Larmor; podemos definir esse fenômeno como o movimento de precessão do spin na presença de um campo magnético constante [3,6,7]. Para simular tal dinâmica iremos usar a plataforma da IBM QE, consideramos um spin $\frac{1}{2}$ dentro de um campo magnético estático na direção z, e definimos o estado inicial e o estado de evolução para medir os componentes de spin nas direções x, y, z [16,42]. Assim será possível visualizar o comportamento de precessão e comparar os resultados experimentais com os resultados teóricos.

2- DINÂMICA DO SPIN 1/2

2.1 - Spin $\frac{1}{2}$ e o experimento de Stern-Gerlach

O experimento de Stern-Gerlach foi idealizado por Otto Stern e realizado em parceria com Walther Gerlach em 1922, teve como propósito fundamental investigar a quantização espacial, ou seja, averiguar se o momento angular dos átomos era quantizado na presença de um campo magnético externo [4]. Esta investigação surgiu com o progresso da teoria quântica, focando particularmente no modelo atômico proposto por Bohr e aprimorado por Sommerfeld [4,18].

O modelo semi-clássico de Bohr-Sommerfeld propõe que os elétrons podem se mover em órbitas elípticas em vários planos orbitais. Onde essas órbitas eram quantizadas não apenas em termos de tamanho e forma, mas também em sua orientação no espaço, por exemplo, em relação a um campo magnético externo [4]. Dessa forma um terceiro número quântico (m) relacionado à direção do momento angular L foi introduzido [4].

O experimento de SG é um aparato onde partículas de Prata (Ag) são aquecidas em um forno que possui uma abertura por onde algumas partículas podem escapar. Um feixe de átomos passa por um colimador que atravessa uma região com um campo magnético descontínuo, onde cada átomo é desviado, e registrados no anteparo [3,16].

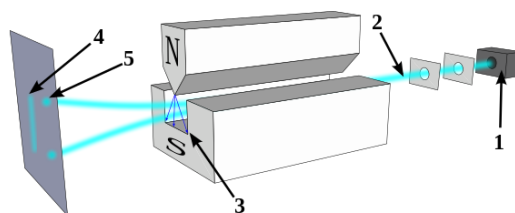


Figura 2.1 – Experimento de Stern Gerlach: (1) forno; (2) átomos de prata; (3) campo magnético descontínuo; (4) resultado clássico; (5) resultado experimental. [5]

Como o campo magnético B é um dipolo magnético, dois polos com cargas opostas que se atraem, seu campo é variável. Logo está sujeito a um potencial [26]

$$\mathcal{U} = -\mu \cdot B \quad 2.1$$

Onde $\mathcal{U}$ é o potencial e $-\mu \cdot B$ é a energia do átomo no campo magnético [18]. Como o campo B não é uniforme, existe uma força sentida pelo o átomo na direção z , dada por:

$$F_z = \frac{\partial(\mu \cdot B)}{\partial z} \quad 2.2$$

Onde μ é o momento magnético do átomo. Na física clássica, não há especificações definidas para a direção ou magnitude do momento angular do átomo, variações na orientação do momento magnético resultam em diferentes valores de μ [18].

O movimento do elétron possui momento angular, logo podemos associar o momento magnético com o momento angular, por meio da seguinte expressão [18]:

$$\mu = \frac{q}{2m} L \quad 2.3$$

Onde q é a carga do elétron, m a massa do elétron e L é o momento angular.

Como o momento angular do átomo é quantizado ele assume apenas valores discretos, sendo assim de acordo com Sommerfeld o segundo número atômico quântico l , associado ao momento angular orbital, assume um número de estados correspondentes iguais $2l + 1$. Segundo a teoria de Bohr o momento angular orbital do átomo de prata deveria ter $l = 1$, obtendo como resultado do experimento o feixe se dividindo em 3, com um dos feixes apontando para o centro do anteparo [18]. Porém de forma intrigante, o que foi observado experimentalmente foram duas componentes distintas, com uma direção “para cima $\uparrow$ ” e outra “para baixo $\downarrow$ ” com nenhum átomo situando-se no meio, sob a perspectiva da física clássica, essa divisão é inusitada e difícil de ser entendida [3,17,18]. Este resultado só pode ser observado pelo fato do átomo de Prata (Ag) possuir 46 elétrons esfericamente simétricos com momento angular nulo e 1 elétron desemparelhado [3].

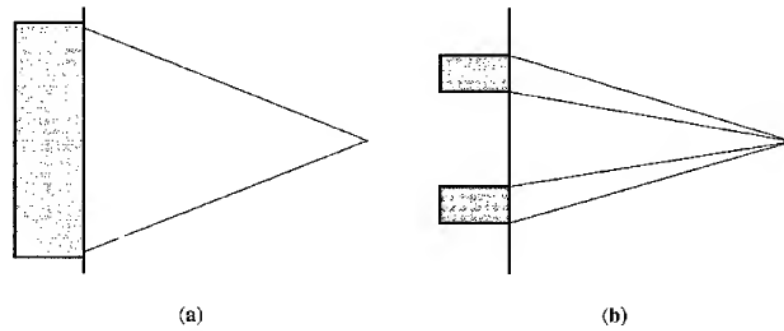
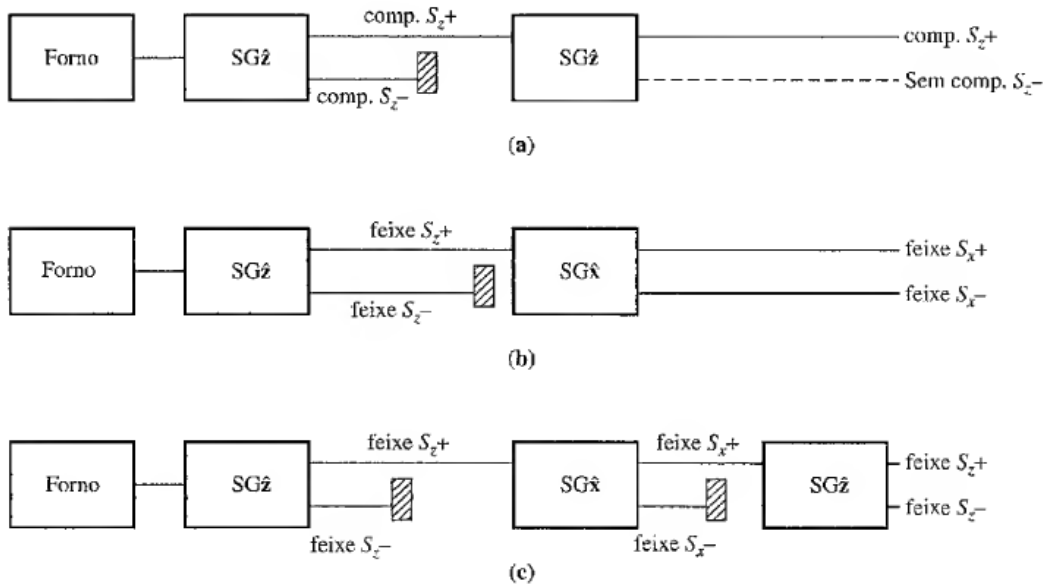


Figura 2.2 – a) previsão clássica do experimento Stern-Gerlach b) resultado observado no experimento [3]

O fato do feixe se dividir em apenas dois, mostra que a teoria de quantização de Bohr-Sommerfeld não foi suficiente para explicar o comportamento dos elétrons. Logo, constatou-se que o momento magnético medido no experimento era o momento angular intrínseco do elétron chamado de spin [3,16]. Assim podemos dizer que o átomo de prata possui apenas o momento angular de spin do 47º elétron, ou seja, o momento magnético do átomo de prata é proporcional ao spin $\frac{1}{2}$ do elétron [3]. O spin não tem uma analogia clássica, mas pode ser visualizado como uma rotação intrínseca que uma partícula possui, sem que ela realmente esteja girando fisicamente no sentido clássico. O spin é quantizado, o que significa que suas possíveis possibilidades e valores são discretos e obedecem a regras específicas, determinadas pela mecânica quântica [4,16]. O spin é representado pelo operador S .

$$S = (S_x \hat{i}, S_y \hat{j}, S_z \hat{k}) \quad 2.4$$

Outras experiências também foram realizadas por meio do SG, como os experimentos Stern-Gerlach sequências. Nestes, os feixes de átomos passam por dois ou mais aparatos em sequência [3]. O primeiro aparato está apontado na direção z com a componente s_z^- bloqueada, fazendo com que os feixes passem apenas pela componente s_z^+ em direção ao segundo aparato que apresenta um campo magnético na direção x . Intuitivamente espera-se que os feixes saiam apenas da componente s_x^+ , porém o que se observa é que o feixe é separado em duas componentes s_x^+ e s_x^- . Como pode ser observado na figura 2.3 – b)



2.3 – Experimento de Stern-Gerlach experimental: (a) 1º e 2º aparato de SG com um campo magnético descontínuo apontado para a direção z; (b) 1º aparato da mesma forma do anterior e o 2º aparatado com um campo magnético descontínuo apontado para a direção x; (c) 3º aparato adicionado com o campo magnético descontínuo apontado para a direção z [3].

Como resultado pôde observar que ao adicionar um segundo aparato, ocorre uma mudança na distribuição dos feixes de átomos, ou seja, o ato de medir altera o sistema [3]. Também foi possível constatar que diferentes componentes do momento angular não comutam entre si.

Das relações de comutação temos que dois observáveis são ditos compatíveis se $[A, B] = 0$ e incompatíveis se $[A, B] \neq 0$. Neste caso, a primeira regra da quantização diz que os operadores devem satisfazer uma relação de comutação [6,16]. Como por exemplo, os operadores de posição e momento que não comutam entre si, mas estabelecem uma relação de comutação.

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad 2.5$$

Desta forma, conseguimos definir as relações de comutação entre os operadores de spin.

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k \quad 2.6$$

Esta relação implica que os componentes de spin são incompatíveis entre si. Portanto, eles não podem ser medidos simultaneamente [3]. Arelado a isso temos uma relação de incerteza de W. Heisenberg, que nos diz que a incerteza na medida

da posição de uma partícula quântica, está relacionada com a incerteza na medida do seu momento [7].

Podemos dizer que o experimento de Stern- Gerlach foi um marco para o desenvolvimento da mecânica quântica. Além de demonstrar a quantização do momento angular com a descoberta do spin, também provou com os experimentos sequenciais que não é possível medir simultaneamente em direções diferentes e que a medida em uma direção altera o resultado da outra [4, 17, 18,21].

2.2 - Operadores do Spin

Com os resultados obtidos através do experimento de Stern-Gerlach, iremos agora descrever o comportamento do spin por meio do formalismo geral da mecânica quântica.

O estado de um sistema quântico é definido por um vetor em espaço vetorial complexo conhecido como espaço de Hilbert ($\mathcal{H}$) [1,16,19], logo as componentes de spin são representadas por um vetor estado. Da eq 2.4 e considerando que o spin esteja orientado na direção z , podemos definir o valor das projeções de spin “para cima” e “para baixo”, como:

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$\pm \frac{\hbar}{2}$ são os autovalores do S_z e podem ser representados como $|+\rangle$ ou $|-\rangle$. Os autovalores de um observável são as únicas possibilidades de se medir uma quantidade física $\hat{A}$ [16,19]. Por meio dos autovalores podemos definir os autovetores associados. Logo temos que:

$$\begin{aligned}\hat{S}_z|+\rangle &= \frac{\hbar}{2}|+\rangle \\ \hat{S}_z|-\rangle &= -\frac{\hbar}{2}|-\rangle\end{aligned}\tag{2.7}$$

Essa associação autovetor-autovalor segue a relação de ortogonalidade, que nos diz que dois kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são ortogonais se $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ [3]. Também podemos escrever estes operadores na forma matricial, considerando:

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad 2.8$$

$$\widehat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Os operadores nas direções x, y podem ser representados, como:

$$\widehat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \widehat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad 2.9$$

Onde $\pm \frac{\hbar}{2}$ também são os seus autovalores, como não há diferença fundamental entre as direções, fica claro que os operadores de spin nessas direções devem ter os mesmos autovalores [7].

As matrizes $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ são conhecidas como matrizes de Pauli e são denotadas por $\sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$ [20,21]. Logo,

$$S_\alpha = \frac{\hbar}{2} \sigma_\alpha \quad 2.10$$

Onde $\alpha = (x, y, z)$

As componentes S_x e S_y , podem ser escritas em termos da base de S_z . Podemos então fazer mudanças de bases para entender como os estados $|\pm_x\rangle, |\pm_y\rangle$ se comportam em questão aos operadores $|+\rangle$ e $|-\rangle$ [16,21]. Diagonalizando as matrizes σ_x, σ_y , temos que:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \det \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1 \quad (18) \quad 2.11$$

Da equação de autovalores, sabemos que:

$$\widehat{S}_x |\pm_x\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm_x\rangle \Rightarrow \sigma_x |\pm_x\rangle = \pm 1 |\pm_x\rangle \quad 2.12$$

Considerando que $|\pm_x\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ onde $[a] = |+\rangle$ e $[b] = |-\rangle$, substituindo na eq. 2.12 chegamos em:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

2.13

$$\Rightarrow |+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

Definimos $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ devido à exigência de que os estados devem ser normalizados

[16]. Agora temos que $| -_x \rangle = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$ onde $[c] = |+\rangle$ e $[d] = |-\rangle$, logo:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ -d \end{bmatrix} \Rightarrow -c = d = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

2.14

$$\Rightarrow | -_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

Dessa maneira

$$\widehat{S}_x |\pm_x\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle + |-\rangle) + (|+\rangle - |-\rangle)] \quad 2.15$$

Para o σ_y é feito de forma análoga

$$|+_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle)$$

$$|-_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i|-\rangle)$$

2.16

Logo temos

$$\widehat{S}_y |\pm_y\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle + i|-\rangle) + (|+\rangle - i|-\rangle)] \quad 2.17$$

Podemos por meio dessas equações mostrar que os operadores nas direções x, y e z satisfazem as relações de comutação [3] discutidas na seção anterior. Sendo assim, podemos também definir o operador S^2 , da seguinte forma:

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad 2.18$$

Este operador é uma constante múltipla de identidade [3]. Logo,

$$[S^2, S_i] = 0 \quad 2.19$$

Para spins com valores maiores que $\frac{1}{2}$, s^2 não é mais um múltiplo de identidade [3].

2.4 – Evolução temporal e precessão do spin

Agora que conhecemos que são os operadores de spin e como encontrar seus autovalores e seus autovetores, falaremos de como os sistemas físicos se comportam ao longo do tempo.

A evolução temporal de um sistema físico é descrito por uma transformação unitária $U(t, t_0)$ que leva o estado $|\Psi_0\rangle$ no instante t_0 ao estado $|\Psi(t)\rangle$ no instante t [26] .

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t, t_0)|\psi_0\rangle \\ \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle &= \langle\psi_0|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi_0\rangle \\ U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) &= 1 \end{aligned} \quad 2.20$$

A unitariedade é uma consequência da conservação de probabilidade [3].

A equação que descreve a dinâmica dos estados quânticos é a equação de Schrodinger

$$H|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \quad 2.21$$

Tudo que está relacionado à evolução temporal deriva desta equação [3]. Dessa forma podemos reescrever a equação (2.21), como:

$$HU(t, t_0) = i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) \quad 2.22$$

Essa equação é conhecida como equação de Schrodinger para o operador de evolução temporal [3]. O hamiltoniano H é um operador em que seu observável corresponde à energia total do sistema, ele está associado a uma evolução temporal. Se H é independente do tempo ele não se altera mesmo quando um tempo t muda, sendo assim a energia total se conserva [3]. Matematicamente operador evolução temporal para um hamiltoniano independente do tempo pode ser representado como:

Multiplicando a equação 2.22 por $|\psi_0\rangle$ à direita em ambos os lados temos:

$$\begin{aligned}
HU(t, t_0)|\psi_0\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0)|\psi_0\rangle \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} U(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} HU(t, t_0) \\
\Rightarrow U(t, t_0) &= e^{-iHU(t, t_0)/\hbar}
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Um exemplo clássico é o hamiltoniano para um momento magnético de spin interagindo com um campo magnético independente do tempo. Vamos considerar um sistema de spin $\frac{1}{2}$ interagindo com um campo magnético externo B constante apontado na direção z , com momento magnético igual a $e\hbar/2m_e c$ [3,6,16]. Seu hamiltoniano é dado:

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) S_z \tag{2.24}$$

H e S_z comutam entre si.

Como o hamiltoniano é um operador associado à energia do sistema, é conveniente definimos um ω , que é dada pela interação do momento magnético do sistema de spin $\frac{1}{2}$ [3,16].

$$\omega = \frac{|e|B}{m_e c} \tag{2.25}$$

Podemos reescrever H como:

$$H = \omega S_z \tag{2.26}$$

O hamiltoniano na forma matricial é dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.27}$$

Dado esse hamiltoniano, definimos um estado físico que descreva esse sistema de spin $\frac{1}{2}$ e o evoluímos com o tempo.

$$|\Psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \tag{2.28}$$

Aplicando o hamiltoniano H nos estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$, temos:

$$\hat{H}|+\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \sigma_z|+\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|+\rangle \tag{2.29}$$

$$\hat{H}|- \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \sigma_z |- \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |- \rangle$$

Da eq. 2.23 temos que a evolução temporal de um sistema pode ser definida por um operador de evolução temporal [3], então:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i\omega S_z t}{\hbar}} \quad 2.30$$

Adicionando este operador no estado inicial, temos:

$$|\Psi\rangle = \alpha e^{-\frac{i\omega t}{2}} |+\rangle + \beta e^{\frac{i\omega t}{2}} |-\rangle \quad 2.31$$

Assim, definimos a evolução temporal para o campo magnético constante.

Agora, considere que um estado esteja em uma direção arbitrária [16,21], com o campo magnético apontado na direção z

$$|\Psi\rangle = \alpha |+_v\rangle + \beta |-_v\rangle \quad 2.32$$

Onde $\alpha = \cos \frac{\theta}{2}$ e $\beta = \sin \theta/2$ e θ é um ângulo fixo. Temos que:

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} |-\rangle \quad 2.32$$

Evoluindo o estado $|\Psi\rangle$ no tempo, encontramos que:

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{-\frac{i\phi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{\frac{i\phi}{2}} |-\rangle \quad 2.33$$

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\phi+\omega t)} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\phi+\omega t)} |-\rangle$$

O ângulo ϕ varia, isso faz com a direção arbitrária v mude com o tempo, realizando um movimento de precessão em torno do campo magnético B [6,16,21]. Essa precessão em torno do campo magnético é conhecida como precessão de Larmor, que pode ser observada na figura 2.4.

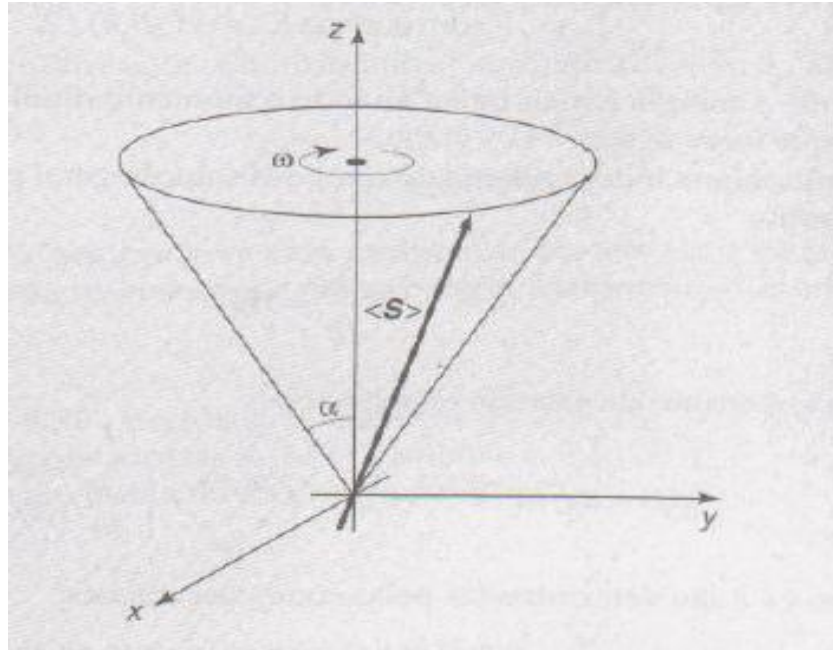


Figura 2.4 – A componente S está inclinada em um ângulo constante α ao eixo z e precessiona em relação ao campo com uma frequência conhecida como frequência de Larmor [6].

Usaremos este exemplo de precessão de Larmor para simula-lo em um computador quântico.

3- INTRODUÇÃO A COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

3.1- História da ciência da computação

A revolução da ciência da computação começou em meados do século XX com o advento das primeiras máquinas capazes de computar [1]. Em 1936, o matemático Alan Turing apresentou uma formulação matemática chamada máquina de Turing, cujo desempenho superava o das máquinas conhecidas que simplesmente executavam as tarefas de contagem e armazenamento de valores [22]. A máquina de Turing foi o primeiro dispositivo baseado em uma formulação algorítmica com a capacidade de ler, escrever e apagar símbolos binários [22,23].

O matemático John Von Neumann era um simpatizante das ideias de Turing e foi o responsável pela criação de um projeto conhecido como "arquitetura Von Neumann" [22] que consiste em uma unidade de armazenamento (CPU), uma memória para armazenar dados e dispositivos de entrada e saída.

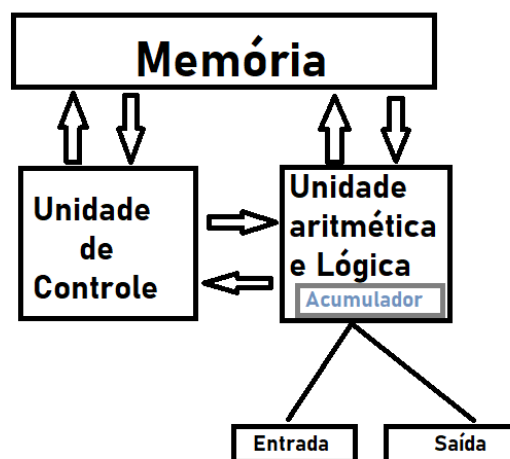


Figura 3.1 – Arquitetura de Von Neumann uma memória, uma unidade aritmética e lógica, e uma unidade central de processamento (CPU). É composta por diversos registradores e uma Unidade de Controle, cuja função é a mesma da tabela de controle da Máquina de Turing universal: buscar um programa na memória, instrução por instrução, e executá-lo sobre os dados de entrada [22].

Nesse modelo de arquitetura, as informações são armazenadas no mesmo espaço de memória, podendo ser manipuladas sequencialmente. Os componentes da arquitetura de Von Neumann regem até hoje o funcionamento de todos os computadores.

Com o avanço da tecnologia, os computadores foram aperfeiçoados. Evoluíram de grandes máquinas para computadores menores e melhores, capazes de realizar as mais diversas funções, como criar planilhas, editar filmes, simular jogos, falar com pessoas distantes, entre outras [1]. Tais tarefas só são possíveis hoje graças ao uso de operadores lógicos, também conhecidos como algoritmos, que são definidos como um conjunto de instruções bem definidas que organizam o processo do início ao resultado final, ou seja, define um caminho para a solução do problema [9]. Quanto mais rápidos esses algoritmos executarem suas tarefas mais eficientes se tornam os computadores.

No entanto, ainda há certas limitações em relação à capacidade de processamento. Os processadores atuais consistem em milhões de transistores e a Lei de Moore nos diz que esses transistores chegariam a um tamanho mínimo, atingindo o seu ápice de desempenho [1]. Uma vez que não seria mais possível miniaturizar os componentes de um processador, levando a computação clássica a não progredir [10]. Portanto, a computação quântica surgiu como uma alternativa viável para esse problema. Por ser uma tecnologia mais eficiente baseada nas leis da física quântica, seu poder de processamento é superior ao dos computadores clássicos.

3.2 – Computação quântica

A computação quântica é um campo de pesquisa em ciência da computação e física quântica que estuda como processar informações usando sistemas quânticos, como qubits, em vez de bits clássicos [10,24]. Esses sistemas quânticos possuem habilidades que ultrapassam as capacidades da computação convencional, incluindo especificações como emaranhamento quântico, superposição e interferência.

Uma das principais aplicações da computação quântica é na solução de problemas que são considerados intratáveis em computadores convencionais, como fatoração de grandes números primos e busca de dados não estruturados [1]. Além disso, tem o potencial de melhorar significativamente a segurança de criptografia e a capacidade de simular sistemas quânticos complexos.

3.2.1 - Conceitos básicos

A teoria clássica é codificada usando bits, que é a menor unidade de medida de transmissão de dados usados na computação, são estados lógicos que assumem apenas dois valores 0 ou 1. Da mesma forma, podemos dizer que a computação quântica é baseada nesse conceito que chamamos de bit quântico (qubit).

Qubit é a unidade básica que armazena informação na computação quântica, que explora os fenômenos de superposição de estados da mecânica quântica. Um sistema pode estar no estado $|0\rangle$ e $|1\rangle$ ao mesmo tempo, formando uma combinação linear de dois estados [1,24].

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (3.1)$$

Onde $|\Psi\rangle$ é o estado formado por meio da combinação linear dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ e α e β são as probabilidades dos estados, em que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

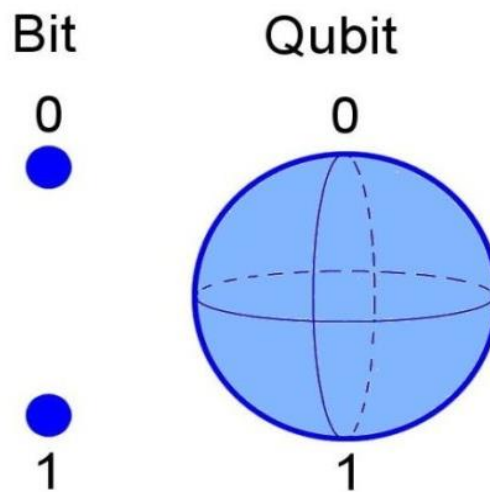


Figura 3.2 – Representação de um bit clássico e um bit quântico [25]

Podemos observar um qubit por meio de sua representação geométrica, que descreve o estado quântico de um único qubit como um vetor tridimensional de valor real [28], conhecida como esfera de Bloch. Dessa forma, o vetor de estado é descrito como:

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \text{ e } \beta = e^{i\gamma} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\gamma}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle \quad (3.2)$$

Onde $e^{i\gamma} = \cos \zeta + i \sin \zeta$ é uma representação de Euler, e os ângulos θ, γ definem os pontos na esfera [26,27]. A esfera de Bloch pode ser visualizada na figura 3.3

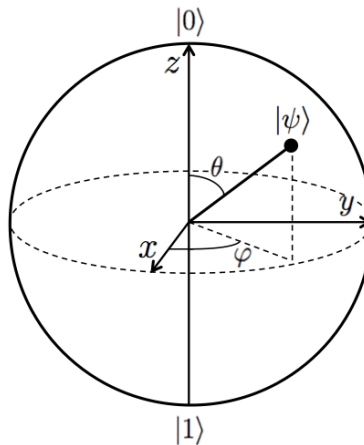


Figura 3.3 – Esfera de Bloch [1]

A superposição permite que os algoritmos quânticos processem informações em uma fração do tempo que levaria um computador clássico. Uma das consequências da superposição são o emaranhamento e a interferência, juntos eles podem resolver problemas exponencialmente mais rápidos [28]. Dois ou mais sistemas quânticos podem exibir emaranhamento quando estão ligados de tal forma que o estado de um sistema não pode ser descrito independentemente do estado do outro [26], isso significa que as medições de um sistema emaranhado podem afetar imediatamente o estado de outro sistema, mesmo que estejam distantes [11,12]. Algumas das aplicações do emaranhamento na computação quântica são o algoritmo de Shor e o algoritmo de Grover. Os qubits também podem interferir uns com os outros, já que cada estado é definido por uma amplitude de probabilidade, essa interferência pode ser construtiva ou destrutiva [28].

Embora os qubits possuam um grande potencial, ainda enfrentam certas fragilidades. O emaranhamento do sistema com seu ambiente, principalmente durante a medida, pode facilmente perturbar o sistema e causar decoerência [28], ou seja, há uma perda de informação do sistema.

3.2.2 – Portas lógicas quânticas

As portas lógicas quânticas são análogas às portas lógicas clássicas, mas operam em qubits. São projetadas de tal maneira que, quando aplicadas a um qubit ou a um conjunto de qubits, a soma das probabilidades dos possíveis estados de saída é sempre igual a um [31]. Isso assegura a conservação da probabilidade, o que é um requisito fundamental na teoria quântica. Devido a essa natureza unitária, as portas lógicas quânticas são reversíveis, o que significa que, para qualquer operação de porta lógica quântica, existe uma operação inversa que pode desfazer o efeito da operação original [29, 31, 37].

❖ Porta NOT

Na computação quântica, a porta NOT é uma porta de negação que opera em qubits, que podem estar em superposição, representando uma combinação linear de 0 e 1 [15]. Ela inverte o estado quântico de um qubit.

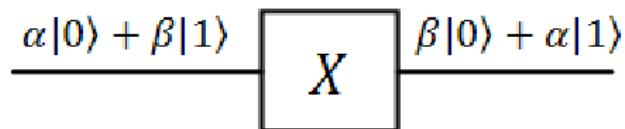


Figura 3.5 – Porta NOT [30]

Matematicamente, a porta NOT quântica é representada pela matriz de Pauli-X [15]:

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

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

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

Se aplicarmos uma porta NOT a um qubit no estado $|0\rangle$, obteremos o estado $|1\rangle$ como resultado. De forma análoga, aplicando a porta NOT a um qubit no estado $|1\rangle$, teremos o estado $|0\rangle$ [15]. Quando aplicamos a porta NOT duas vezes consecutivas a um qubit, obteremos o seu estado original, podendo assim dizer que ela é uma porta reversível [31].

A porta NOT quântica é uma porta lógica simples, mas desempenha um papel importante na construção de circuitos quânticos mais complexos. Ela é frequentemente combinada com outras portas lógicas quânticas para realizar operações mais sofisticadas e realizar cálculos em computação quântica [30].

Da mesma forma da porta NOT ou porta X, as portas Y e Z também atuam em circuitos e executam rotações em torno dos eixos y e z em uma esfera de Bloch.

▪ Porta Hadamard (H)

A porta Hadamard (H) é uma das portas lógicas quânticas fundamentais e é amplamente usada na computação quântica, desempenha um papel crucial no desenvolvimento de importantes algoritmos quânticos [32]. Ela opera em um único qubit e é representada por:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

A porta Hadamard altera a base de um qubit. Ela mapeia a base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ para a base de Hadamard $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, [32] onde:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Ela também é responsável por causar reflexões e rotações nos estados dos qubits. Se aplicarmos a porta Hadamard em um estado do tipo $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle + |1\rangle]$, teremos um estado fundamental [1,17]. Como podemos observar na figura abaixo:

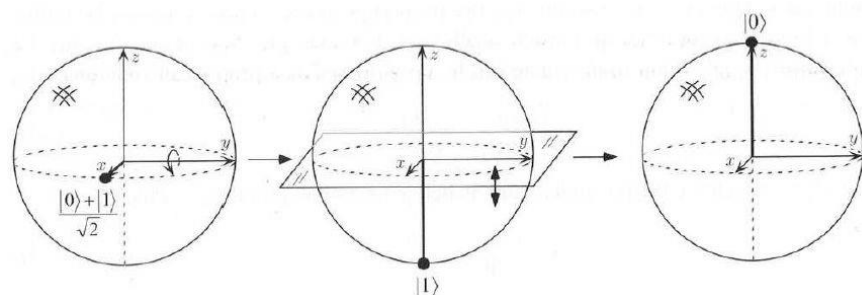


Figura 3.6 – A porta Hadamard causa reflexões e rotações do plano dos qubits, cada transformação da seta pode ser considerada como uma rotação de um dos eixos [1].

Sua capacidade de criar e manipular superposições são fundamentais para a realização de cálculos paralelos na computação quântica.

▪ Porta CNOT

A porta CNOT é uma porta que atua em dois qubits, sendo um de controle e um de destino. É responsável por aplicar uma operação de negação (NOT) no qubit de destino somente se o qubit de controle estiver no estado $|1\rangle$ [15,24,33]. É representada por:

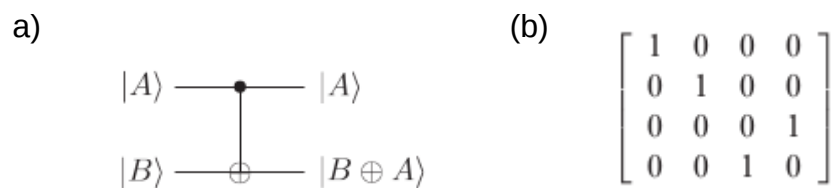


Figura 3.6 – Porta CNOT (a) Neste circuito a porta CNOT inverte B caso o valor de A seja 1 e mantém B se o valor de A for 0 [15]. (b) Matriz que representa a porta CNOT [39]

Essa matriz descreve como a porta CNOT age nos estados dos dois qubits. Ela é frequentemente usada para criar um emaranhamento entre dois qubits, que inicialmente estavam em um estado separável [24].

3.3 – Simulações de sistemas quânticos

A simulação de sistemas quânticos é um campo importante da computação quântica, onde são feitas tentativas de entender e simular o comportamento de sistemas quânticos complexos. Possui uma variedade de aplicações e é usado para estudar o comportamento de moléculas quânticas, materiais quânticos, sistemas de partículas e sistemas de muitos corpos [35].

As simulações destes sistemas são feitas através de softwares, que são executados em computador clássico que atua como um computador de destino para um programa quântico, permitindo que ele seja executado em um ambiente que prevê como o qubit responderá a diferentes operações [34]. Existem várias plataformas e ferramentas disponíveis para realizar simulações quânticas baseadas em circuitos quânticos ou abordagens de computação quântica em nuvem. Aqui estão algumas das mais populares [2,37,19]:

- Qiskit: É uma plataforma de desenvolvimento quântico de código aberto, criada pela IBM para a programação e simulação de circuitos quânticos. Oferece uma variedade de ferramentas e bibliotecas para a simulação de sistemas quânticos, além de definir e implementar programas em simuladores locais e processadores quânticos baseados em nuvens [37].
- IBM Quantum Experience: É uma plataforma em nuvem fornecida pela IBM que possibilita que os usuários realizem simulações quânticas e experimentos em computadores quânticos reais. A plataforma possui um simulador quântico, bem como acesso a dispositivos quânticos reais para execução de algoritmos e experimentos [2].
- Microsoft Quantum Development Kit: É um conjunto de ferramentas e bibliotecas fornecidas pela Microsoft para o desenvolvimento e simulação de algoritmos quânticos. É uma linguagem de código aberto que permite criar e otimizar programas quânticos [38].

Entretanto, a simulação de sistemas quânticos enfrenta enormes desafios computacionais, principalmente em relação à estabilidade do sistema. Além de sua complexidade computacional em sistemas de grandes dimensões, as partículas quânticas são bastante sensíveis a qualquer tipo de perturbação, tornando difícil mantê-las no estado desejado [35].

4- SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DE UM SPIN

A IBM QE é uma plataforma gratuita que fornece acesso a computadores quânticos de até 15 qubits e seus simuladores possuem capacidade de até 5000 qubits. Nela é possível criar circuitos quânticos com o auxílio das ferramentas e bibliotecas fornecidas pelo o Qiskit [39]. Utilizaremos a plataforma da IBM QE para simular experimentalmente o resultado teórico de um sistema quântico de dois níveis, conhecido como precessão de Larmor.

4.1 – Operando um qubit na plataforma da IBM QE

Podemos representar o estado de um qubit, da seguinte forma [40]:

$$|q\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (4.1)$$

Onde θ, ϕ são números reais.

As portas quânticas realizam alterações entre os qubits desses estados [40]. Além das portas já discutidas na seção 4.2.2, também iremos demonstrar aqui outras portas reversíveis necessárias para a simulação de um sistema quântico. As portas quânticas são representadas por matrizes unitárias 2x2 e sua atuação se dão quando é multiplicada por um vetor estado [41].

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (4.2)$$

A porta U-gate é a forma mais geral para representar um qubit único, e é determinada como:

$$U_3(\theta, \phi, \lambda) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -e^{-i\lambda}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} & e^{i(\lambda+\phi)}\cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Mas devido a sua complexidade em relação ao seu tempo de execução, algumas portas derivadas da U_3 são mais utilizadas, como a U_2 e U_1 . A porta U_2 é uma porta que permite criar superposições [41].

$$U_2(\lambda, \phi) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{e^{-i\lambda}}{\sqrt{2}} \\ e^{i\phi} & e^{i(\lambda+\phi)} \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

Onde $U_2(\lambda, \phi) = U_3(\pi/2, \lambda, \phi)$. A porta U_1 é uma porta de fase, que realiza uma rotação em torno do eixo z [40].

$$U_1(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\lambda} \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Onde $U_1(\lambda) = U_3(0, 0, \lambda)$.

4.2 – Medidas físicas em sistema de spin $\frac{1}{2}$

Um sistema de spin $\frac{1}{2}$ é representado apenas por dois estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, que também são as bases computacionais usadas em um computador quântico da IBM [42]. Essas bases nos permitem realizar medidas através de um estado quântico qualquer. Como por exemplo, a medida do estado dada pela eq. 3.1 nos fornece probabilidades do tipo $|\alpha|^2$ e $|\beta|^2$.

Logo se quisermos medir computacionalmente a componente de spin ao longo da direção z, temos que:

$$\mathcal{M}_z = \langle \psi | S_z | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) \quad (4.6)$$

As direções x e y podem ser medidas de forma análoga, entretanto como o Qiskit só permite medições na base computacional Z, é necessário utilizar algumas portas quânticas para realizar medidas em qualquer base.

Para obter a medida $\mathcal{M}_x = \langle \psi | S_x | \psi \rangle$, usaremos porta Hadamard para mudar o estado do qubit entre as bases X e Z [40]. Dada a seguinte relação:

$$\mathcal{M}_x = \langle \psi | HZH | \psi \rangle = \langle \psi | S_z | \psi \rangle \quad (4.7)$$

$$S_x = HZH$$

A porta H muda o qubit para base X, a porta Z executa uma porta not na base X e a última porta H retorna o qubit para a base Z [40].

$$HZH = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = X$$

Figura 4.1 – Criando uma porta X [40].

Seguindo a mesma lógica, usaremos uma porta de rotação para realizarmos a medida $\mathcal{M}_y = \langle \psi | S_y | \psi \rangle$. As portas de rotações são portas padrões que realizam rotações em torno das portas $\{X, Y, Z\}$ [41]. A rotação em torno do eixo x pode ser definida como:

$$R_x(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Para $\theta = -\frac{\pi}{2}$, temos:

$$R_x(-\pi/2) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

A partir da eq. 4.8 podemos mostrar que $S_y = R_x(-\pi/2)S_zR_x^\dagger(-\pi/2)$ [42]. Logo:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_y &= \langle \psi | R_x(-\pi/2)S_zR_x^\dagger(-\pi/2) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi_y | S_z | \psi_y \rangle \end{aligned} \quad (4.10)$$

Onde $|\psi_y\rangle = R_x^\dagger(-\pi/2)|\psi\rangle$, assim os componentes de spin podem ser medidas em quaisquer direções [42].

4.3 – Dinâmica de um spin em um computador quântico

Na Seção 2.4 discutimos a precessão de um spin, interagindo com um campo magnético constante apontando na direção z. Voltaremos agora à discussão desse fenômeno de forma experimental.

Dado um estado inicial em uma direção qualquer, temos:

$$|\psi_0\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (4.11)$$

Onde $\theta = [0, \pi]$.

Associado a um hamiltoniano dado pela eq. 2.26. A evolução deste estado no tempo pode ser descrita como

$$|\psi(t)\rangle = U_0(t)|\psi_0\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\omega t} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (4.12)$$

Agora, usando as relações 4.6, 4.7 e 4.10 podemos calcular o comportamento das grandezas físicas [42].

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_z &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta & \mathcal{M}_x(t) &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\omega_0 t) \\ \mathcal{M}_y(t) &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\omega_0 t)\end{aligned}\tag{4.13}$$

Podemos utilizar esse conjunto de equações para visualizar a precessão, definido um vetor rotação em um plano xy [42].

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{xy} &= \mathcal{M}_x + \mathcal{M}_y \\ \mathcal{M}_{xy} &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta (\cos(\omega_0 t) + \sin(\omega_0 t))\end{aligned}\tag{4.14}$$

$\mathcal{M}_{xy}$ representa uma rotação em torno do eixo z. Portanto podemos representar o vetor $\mathcal{M}$ como:

$$\begin{aligned}\mathcal{M} &= \mathcal{M}_z + \mathcal{M}_x + \mathcal{M}_y \\ \mathcal{M} &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta + \frac{\hbar}{2} \sin \theta (\cos(\omega_0 t) + \sin(\omega_0 t))\end{aligned}\tag{4.15}$$

Três passos são necessários para simular esta precessão [42]:

1. O estado inicial $|\psi_0\rangle$ deve ser preparado e obtido por meio do estado de entrada $|0\rangle$. Considerando a eq 4.3 e fazendo $U_3(\theta, \phi, \lambda) = U_3(\theta, 0, 0)$, podemos obter o estado inicial

$$U_3(\theta, \phi, \lambda) = \begin{bmatrix} \cos \theta/2 & -\sin \theta/2 \\ \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{bmatrix}$$

2. A evolução temporal do operador $U_0(t)$ deve ser definida pela porta U_1 considerando $\lambda = \omega_0 t$.
3. A medida da componente z do spin é dada pela base computacional $|0\rangle$ e $|1\rangle$, já que não é necessário incluir rotações. Para medir as componentes x e y é preciso implementar a porta Hadamard e a porta de rotação respectivamente, como foi discutido na seção 4.2.

A figura abaixo esboça um circuito desenvolvido com base nessas três etapas

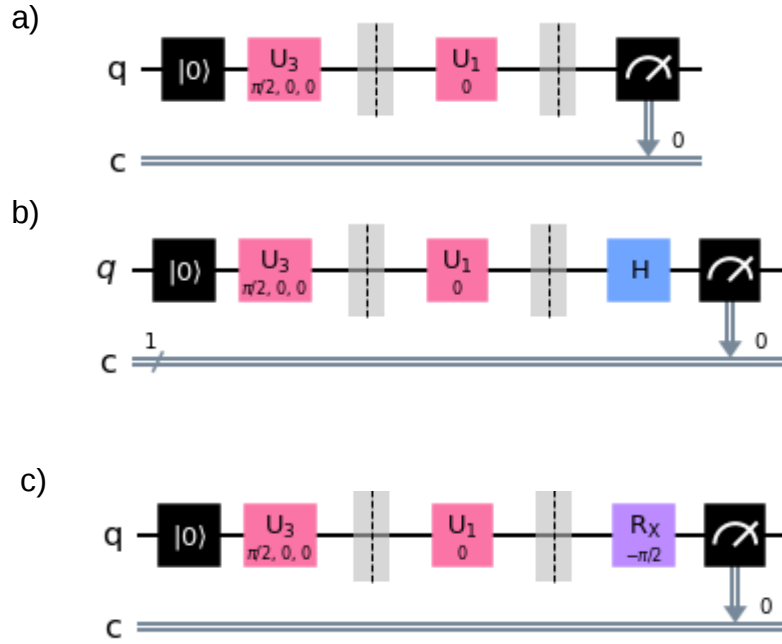


Figura 4.2 – Circuito usado para a dinâmica de medição. (a) Representa o circuito na direção z , onde o estado de entrada é $|0\rangle$, o estado inicial é $U_3(\theta, 0, 0)$ com $\lambda = 0$ e $\theta = \pi/2$ e a evolução temporal é definida por U_1 (b) Representa o circuito na direção x em que H é a porta Hadamard implementada (c) Representa o circuito na direção y em que R_x é a porta de rotação.

Os circuitos fornecem os valores das probabilidades $p_{0(x,y,z)}$ e $p_{1(x,y,z)}$, logo podemos obter os valores experimentais das medidas de $\mathcal{M}_{x,y,z}$ [42].

$$\mathcal{M}_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} [p_{0(x,y,z)}(\omega_0 t) - p_{1(x,y,z)}(\omega_0 t)] \quad (4.16)$$

Por meio desta equação, podemos comparar os resultados teóricos fornecidos pela eq. 4.13. Os resultados obtidos são mostrados a seguir na figura 4.3 e os códigos utilizados podem ser encontrados no apêndice A.

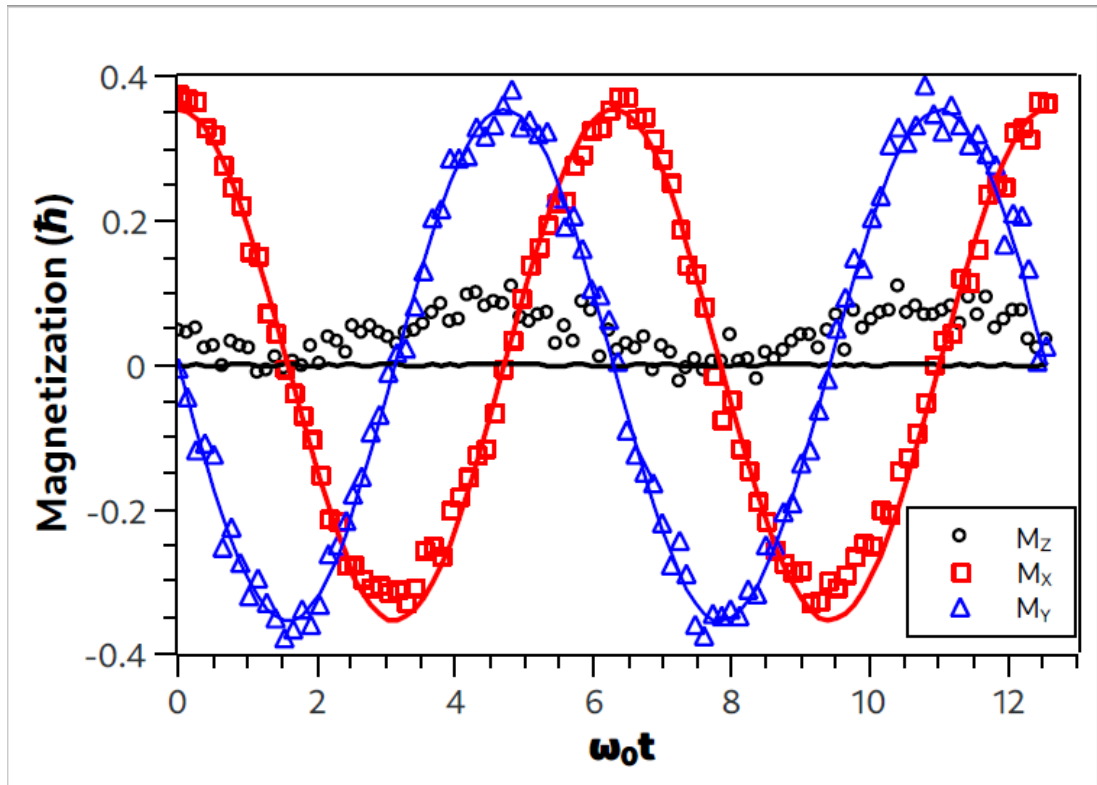


Figura 4.3 – Medidas da magnetização ao longo das direções x (vermelha), y (azul) e z (preta) em função de $\omega_0 t$ com $\theta = \frac{\pi}{2}$ e λ variando de $[0, 4\pi]$. Os pontos são os dados experimentais obtidos pelo o computador da IBM QE.

A Figura 4.3 apresenta dados teóricos e experimentais para dinâmica de spin. As curvas sólidas são as linhas que representa a simulação realizada em um computador quântico emulado em um computador doméstico usando o pacote estatístico da biblioteca Qiskit no python. Não apresentam ruídos, nem problemas de decoerência de um computador quântico e não possuem problemas no tempo de relaxação das portas. Os círculos, quadrados e triângulos são os dados experimentais colhidos da simulação em um computador quântico real implementado no processador quântico `ibmq_lima` (para mais detalhes vê seção A.4 do Apêndice A). Diferente das curvas os pontos apresentam bastante ruído, isso ocorre devido ao fato de que eles foram retirados de um resultado experimental. Cada ponto equivale à medida de magnetização para um valor ωt onde o algoritmo quântico é repetido mil e vinte quatro vezes para que o computador clássico realize uma média dessas repetições.

Como o computador quântico é uma plataforma experimental, ele acaba sendo afetado pelas perturbações externas do ambiente causando um problema de

decoerência com o tempo, já que é um sistema extremamente sensível. Outro problema associado a esse sistema quântico é o tempo de relaxação dos qubits supercondutores da IBM QE, quando uma porta é implementada o tempo de relaxação necessário para o sistema reiniciar e simular novamente o algoritmo muitas vezes é maior do que o tempo de implementação das portas. Logo a computação acaba sendo feita em um sistema não relaxado por completo e isso acarreta em erros sistemáticos ao longo da simulação em um computador quântico real. Isso fica claro quando observamos a curva no eixo z , ela apresenta uma oscilação semelhante a uma senoide, mas o esperado seria uma magnetização em zero. Esses valores discrepantes acima de zero ocorre pelo o fato do sistema não ter relaxado tempo suficiente para programar o algoritmo novamente.

Além disso, a taxa de erro associado a cada qubit utilizado para simular a magnetização pode ser observada. Utilizamos apenas três qubits para implementar o algoritmo; O qubit 0 refere-se a taxa de erro do eixo z , e os qubits 1 e 2 referem-se as taxas de erros dos eixos x e y respectivamente. Os qubits 0 e 2 são os qubits com maior taxa de erro de leitura e por conta disso são as medidas com mais ruído no sistema comparadas ao qubit 1. O gráfico associado à taxa de erro de leitura pode ser encontrado no apêndice B.

5 – CONCLUSÃO

Neste trabalho definimos elementos necessários, para entender como se dá a rotação de um spin interagindo com um campo magnético constante e simular esse fenômeno experimentalmente em um computador quântico utilizando recursos disponibilizados pela plataforma da IBM QE.

Para entender essa realidade, alguns objetivos são definidos. Primeiramente, nos propusemos a investigar as propriedades quânticas necessárias para entender a dinâmica do spin, que estuda como os estados de spin das partículas mudam ao longo do tempo e sob diferentes condições, e tem implicações profundas tanto na física fundamental quanto em aplicações tecnológicas. Após o estudo, investigamos detalhadamente os aspectos físicos da precessão de Larmor, buscando entender as suas principais características, como e por que ocorre tal fenômeno. Uma vez definidas as propriedades físicas, passamos para a fase da simulação em computador quântico.

Nesta etapa, buscamos aprender mais sobre informação e computação quântica. Apresentamos brevemente a história da computação, destacando o progresso da computação e os problemas encontrados ao longo dos anos e como eles foram resolvidos. A conexão da computação com a mecânica quântica permitiu uma mudança no estudo dos algoritmos, através dos algoritmos quânticos foi possível desenvolver portas lógicas que são fundamentais para a computação quântica. Logo depois realizamos as simulações e comparamos os resultados obtidos com os resultados teóricos já existentes.

Muito conhecimento foi adquirido na descrição do fenômeno da precessão de Larmor, além das leis e definições matemáticas, o uso de softwares quânticos deu outra visão para o mesmo fenômeno, trazendo mais incentivos para o campo de pesquisa. No entanto, existem poucos materiais de estudo sobre esse tema no momento, o que traz certas limitações para o progresso da pesquisa.

Por fim, a ideia era salientar a importância da computação quântica para a inovação de novas tecnologias, impulsionando o crescimento científico e tecnológico no nosso país.

REFERÊNCIAS

- [1] DOS SANTOS CONCEIÇÃO JÚNIOR, O. **Computação quântica - algoritmos quânticos**. Universidade Federal do Recôncavo da Bahia, 2016.
- [2] SANTOS, A. C. O Computador Quântico da IBM e o IBM Quantum Experience. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 39, n. 1, 2016.
- [3] SAKURAI AND JIM NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna 2ª edição**, (J. J. Sakurai Jim Napolitano). 2013.
- [4] GOMES, G. G.; PIETROCOLA, M. O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quase-história. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, n. 2, p. 2604, 2011.
- [5] **9: Electron spin and multi-electron atoms**. Disponível em: https://chem.libretexts.org/Courses/New_York_University/ Acesso em: 6 jul. 2023.
- [6] David J. Griffiths. **Mecânica Quântica 2ª edição**. 2011.
- [7] NOVAES, M.; STUDART, N. **Mecânica Quântica Básica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016. – (Série MNPEF)
- [8] **Máquina de Turing: o que é e como funciona**. Disponível em: <https://nairaquest.com/pt/topics/8856-turing-machine-what-it-is-and-how-it-works>. Acesso em: 6 junho. 2023.
- [9] NOLETO, C. **Algoritmos: O que são e exemplos de uso na programação!** Disponível em: <https://blog.betrybe.com/tecnologia/algoritmo/>. Acesso em: 6 junho. 2023.
- [10] AUGUSTO, Acsa Laiane Arcanjo. **Cibersegurança na Computação Quântica**. 2022. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Federal do Rio Grande do Norte.
- [11] RIGOLIN, Gustavo Garcia. **Estados quânticos emaranhados**. 2005. Tese de Doutorado. [sn].
- [12] TAVARES, F.; PADRÃO, S. **Computação quântica: um estudo de emaranhamento quântico aplicado à ressonância magnética nuclear**. Universidade de São Paulo – USP, 2020.
- [13] RIGOLIN, Gustavo. Emaranhamento quântico. **Physicae**, v. 7, n. 1, p. 1-7, 2008.
- [14] PAMPLONA, S. **Aplicação da Computação Quântica na Resolução de Problemas Computacionais**. Disponível em: <https://notapositiva.com/aplicacao-da-computacao-quantica-na-resolucao-problemas-computacionais/?lang=pt-br> . Acesso em: 6 jul. 2023.

[15] CHAGAS, F. **Portas lógicas quânticas**. Disponível em: <https://medium.com/cq-em-portugu%C3%AAs/portas-l%C3%B3gicas-qu%C3%A2nticas-ed014c43a381> . Acesso em: 6 jul. 2023.

[16] **Mecânica quântica - Spin e experimento de Stern-Gerlach - Aula 3.1**. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=feWYbljFOMI>. Acesso em: 6 jul. 2023.

[17] **Mecânica Quântica – Introdução II**. Disponível em: <https://lusoacademia.org/2015/08/16/mecanica-quantica-introducao-ii/> . Acesso em: 6 jul. 2023.

[18] ALENCAR, A. J. T. **Efeitos de interferência envolvendo átomos de hidrogênio metaestáveis com e sem a presença de campo magnético externo**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa de Pós Graduação em Física, 2018.

[19] **Postulados da Mecânica Quântica**. Disponível em: <https://www.studocu.com/pt-br/document/universidade-federal-do-piaui/mecanica-quantica/postulados-da-mecanica-quantica-cohen-tannoudji/17746966>. Acesso em: 6 jul. 2023.

[20] TORT, A. C. **Adição de dois spins/2**. Disponível em: https://www.if.ufrj.br/~pef/producao_academica/material_didatico/2014/Tort_SomaSpins.pdf. Acesso em: 6 jul. 2023.

[21] ALCARÁS, J.R. **Mecânica Quântica - spin**. Disponível em: https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/1260902/mod_resource/content/3/2015_jose_renato_spin.pdf .Acesso em: 6 jul. 2023.

[22] **Os pais da computação: Alan Turing e Von Neumann (História da computação - Parte 3)**. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=0ILCD6mx9W4> . Acesso em: 6 jul. 2023.

[23] KOWALTOWSKI, T. Von Neumann: suas contribuições à Computação. **Estudos Avançados**, v. 10, n. 26, p. 237–260, 1996.

[24] **Informação Quântica**. Disponível em: http://lilith.fisica.ufmg.br/~adojorio/livros/capitulos/quantica/quantica_cap17.pdf. Acesso em: 6 jul. 2023.

[25] Hussain, Zahid. **Strengths and Weaknesses of Quantum Computing**. International Journal of Scientific and Engineering Research, 2016.

[26] CRUZ, C. **Mecânica Quântica – Notas de aula**. 2022 (No prelo).

[27] PINTO, Eric M. et al. Sobre os Estados Emaranhados. **Physicae Organum-Revista dos Estudantes de Física da UnB**, v. 1, n. 1, 2015.

- [28] **O que é um Qubit?** .Disponível em: <https://azure.microsoft.com/pt-br/resources/cloud-computing-dictionary/what-is-a-qubit/>. Acesso em: 6 jul. 2023.
- [29] CRUZ, C. **Computação Quântica Aplicada – Notas de aula**. 2021 (No prelo).
- [30] MACHADO, T.S. **Portas lógicas quânticas a partir do efeito Kondo em um sistema de dois pontos quânticos**. Universidade Federal do Fluminense. 2021.
- [31] JOSÉ, Marcelo Archanjo; PIQUEIRA, José Roberto Castilho; LOPES, Roseli de Deus. Introdução à programação quântica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 35, p. 1-9, 2013.
- [32] **A entrada para compreender a computação quântica**. Disponível em: <https://ichi.pro/pt/a-entrada-para-compreender-a-computacao-quantica-89608543072509>. Acesso em: 6 jul. 2023.
- [33] VON ZUBEN. F. **Introdução à Computação Natural**. Disponível em: https://www.dca.fee.unicamp.br/~vonzuben/ia013_1s14/notas_de_aula/topico10_IA013_1s2014_Parte1.pdf. Acesso em: 6 jul. 2023.
- [34]. **Simuladores quânticos na memória**. Disponível em: <https://learn.microsoft.com/pt-br/azure/quantum/machines/> . Acesso em: 11 jul. 2023.
- [35] **O Futuro do Computador: Introdução ao Processamento Quântico**. Disponível em: <https://www.vidasemfio.com/processamento-quantico/> . Acesso em: 11 jul. 2023
- [36] GUNZI, A. **Interpretação da porta Hadamard como rotações**. Disponível em: <https://informacaoquantica.wordpress.com/2021/07/30/interpretacao-da-porta-hadamard-como-rotacoes/> . Acesso em: 11 jul. 2023.
- [37] **Qiskit**. Disponível em: <https://qiskit.org/> . Acesso em: 11 jul. 2023.
- [38] **Microsoft Quantum Development Kit - Visual Studio marketplace**. Disponível em: <https://marketplace.visualstudio.com/items?itemName=quantum.DevKit> . Acesso em: 11 jul. 2023.
- [39] NUNES OLIVEIRA, Antônio et al. Algoritmos quânticos com IBMQ Experience: Algoritmo de Deutsch-Jozsa. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 44, 2022.
- [40] **Single qubit gates**. Disponível em: <https://learn.qiskit.org/course/ch-states/single-qubit-gates> . Acesso em: 11 jul. 2023.
- [41] **Resumo das Operações Quânticas — documentação Qiskit 0.29.0**. Disponível em: https://qiskit.org/documentation/locale/pt_BR/tutorials/circuits/3_summary_of_quantum_operations.html . Acesso em: 11 jul. 2023.

[42] ALVES, Émerson M. et al. Simulando a dinâmica de um único giro em um chip IBM de cinco qubits. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 42, p. e20190299, 2020.

APÊNDICE A – Implementação do Código Quântico

A.1 Magnetização na direção Z

Importando as bibliotecas e implementando as operações unitárias para definir os circuitos.

```
from qiskit import *
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from qiskit.tools.monitor import job_monitor
from qiskit.visualization import plot_histogram
from qiskit.visualization import plot_bloch_multivector
%matplotlib inline
```

```
Q = QuantumRegister(1, 'q')
C = ClassicalRegister(1, 'c')

circuit = QuantumCircuit(Q,C)
circuit.reset([Q[0]])
circuit.u3(np.pi/2,0,0, [Q[0]])
#lambda = 0
#theta = 90 and phi = 0
circuit.barrier()
circuit.draw(output = 'mpl')
```

Evolução do circuito através da porta $U_1(t)$

```
In [3]: circuit.u1(0, [Q[0]])
        # now lambda is variable
        circuit.barrier()
        circuit.draw(output = 'mpl')
```

Medindo a componente z- spin

```
In [4]: circuit.measure(Q,C)
        circuit.draw(output = 'mpl')
```

Realizando a simulação em um computador da IBM QE

```
In [5]: IBMQ.load_account()
        provider = IBMQ.get_provider('ibm-q')

C:\Users\JHE-F\anaconda3\lib\site-packages\qiskit\providers\ibmq\ibmqfactory.py:192: UserWarning: Timestamps in IBMQ backend properties, jobs, and job results are all now in local time instead of UTC.
  warnings.warn('Timestamps in IBMQ backend properties, jobs, and job results '
```

```
In [8]: comput = provider.get_backend('ibmq_santiago')

In [10]: job = execute(circuit, backend=comput)

In [11]: job_monitor(job)

Job Status: job has successfully run

In [12]: resultado = job.result()
         plot_histogram(resultado.get_counts(circuit))
```

A.2 Magnetização na direção X

```
In [1]: from qiskit import *
        import numpy as np
        import matplotlib.pyplot as plt
        from qiskit.tools.monitor import job_monitor
        from qiskit.visualization import plot_histogram
        from qiskit.visualization import plot_bloch_multivector
        %matplotlib inline

In [2]: Q = QuantumRegister(1, 'q')
        C = ClassicalRegister(1, 'c')

        circuit = QuantumCircuit(Q,C)
        circuit.reset([Q[0]])
        circuit.u3(np.pi/2,0,0, [Q[0]])
        #lambda = 0
        #theta = 90 and phi = 0
        circuit.barrier()
        circuit.draw(output = 'mpl')

In [3]: circuit.u1(0, [Q[0]])
        # now lambda is variable
        circuit.barrier()
        circuit.draw(output = 'mpl')
```

Medindo a componente x – spin usando a porta de rotação Hadamard

```
In [4]: circuit.h(Q[0])
        circuit.measure(Q,C)
```

```
circuit.draw(output = 'mpl')
```

Simulando no computador da IBM QE

```
In [5]: IBMQ.load_account()
        provider = IBMQ.get_provider('ibm-q')
```

```
In [6]: comput = provider.get_backend('ibmq_lima')
        job = execute(circuit, backend=comput)
        job_monitor(job)
```

Job Status: job has successfully run

```
In [7]: resultado = job.result()
        plot_histogram(resultado.get_counts(circuit))
```

A.3 Magnetização na direção Y

```
In [1]: from qiskit import *
        import numpy as np
        import matplotlib.pyplot as plt
        from qiskit.tools.monitor import job_monitor
        from qiskit.visualization import plot_histogram
        from qiskit.visualization import plot_bloch_multivector
        %matplotlib inline

        Q = QuantumRegister(1, 'q')
        C = ClassicalRegister(1, 'c')

        circuit = QuantumCircuit(Q,C)
        circuit.reset([Q[0]])
        circuit.u3(np.pi/2,0,0, [Q[0]])
        #lambda = 0
        #theta = 90 and phi = 0
        circuit.barrier()
        circuit.draw(output = 'mpl')
```

Implementação e medição da componente y, usando a porta de rotação rx

```
In [2]: circuit.u1(0, [Q[0]])
# now lambda is variable
circuit.barrier()
circuit.draw(output = 'mpl')
circuit.rx(-np.pi/2, Q[0])
circuit.measure(Q, C)
circuit.draw(output = 'mpl')
```

Simulando no computador da IBM QE

```
In [3]: IBMQ.load_account()
provider = IBMQ.get_provider('ibm-q')

C:\Users\JHE-F\anaconda3\lib\site-packages\qiskit\providers\ibmq\ibmqfactory.py:192: UserWarning: Timestamps in IBMQ backend properties, jobs, and job results are all now in local time instead of UTC.
  warnings.warn('Timestamps in IBMQ backend properties, jobs, and job results '

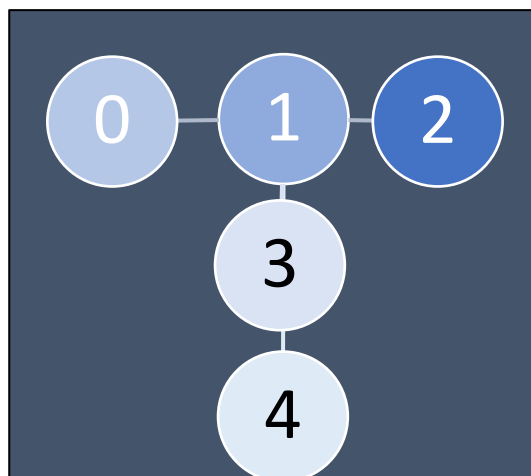
In [4]: compute = provider.get_backend('ibmq_belem')
job = execute(circuit, backend=compute)
job_monitor(job)

Job Status: job has successfully run

In [5]: resultado = job.result()
plot_histogram(resultado.get_counts(circuit))
```

A.4 Esquema do processador quântico

A figura mostra como estão conectados no processador os qubits supercondutores da IBM. Como não há aplicação de portas controladas de mais de um qubit, não tem problema de interconectividade entre eles.



APÊNDICE B – TAXA DE ERRO DE LEITURA

