UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Julián Andrés Vargas Grajales

Caracterização da evolução adiabática em
cadeias de spin

São Carlos

2018

Julián Andrés Vargas Grajales

Caracterização da evolução adiabática em cadeias de spin

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de concentração: Física Básica
Orientador: Dr. Frederico Borges de Brito

Versão Corrigida

(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2018

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Vargas Grajales, Julian Andrés

Caracterização da evolução adiabática em cadeias de spin
/ Julian Andrés Vargas Grajales; orientador Frederico
Borges de Brito - versão corrigida -- São Carlos, 2018.
116 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Física
Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade
de São Paulo, 2018.

1. Computação quântica. 2. Teorema adiabático. 3. Qubits
supercondutores. 4. Condições de adiabaticidade. I. Brito,
Frederico Borges de, orient. II. Título.

*para meus pais e minha irmã, pelo amor incessante e as fortalezas
outorgadas para afrontar cada instante difícil...*

Agradecimentos

Ao Frederico Brito “Fred” gostaria agradecer profundamente por ser meu guia e colega nessa intensa jornada de vários anos, por sua paciência, preocupação, dedicação e me transmitir esse conhecimento e confiança pelo qual eu sinto muita admiração.

Ao Rodrigo, Lady, Viviana e Mariela peças essenciais para minha existência e sem dúvida não teria conseguido chegar a esta etapa de minha vida.

Aos meus grandes amigos que conheci no IFSC, Oscar Duarte, André Malavazi, Gabriela Martins, Diego Carvajal, João Getelina e Matt Schossler.

Aos velhos amigos Diego Rengifo, Carlos Palechor, José David Rivera e Diana Meneses que apesar da distância física que pudesse existir, sempre foram um grande apoio para mim.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

VARGAS-GRAJALES, J. A. **Caracterização da evolução adiabática em cadeias de spin**. 2018. 116 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

A computação quântica adiabática tem sua pedra angular no teorema adiabático, cuja eficiência está relacionada tradicionalmente à proporção da variação temporal do Hamiltoniano que descreve o sistema e o gap mínimo entre o estado fundamental e o primeiro excitado. Normalmente, esse gap tende a diminuir quando aumenta o número de recursos (bit quântico: qubit) de um processador quântico, exigindo dessa maneira variações lentas do Hamiltoniano para assim garantir uma dinâmica adiabática. Entre os candidatos para a sua implementação física, estão os qubits baseados em circuitos supercondutores os quais têm um grande potencial, por causa de seu alto controle e escalabilidade promissora. No entanto, quando esses qubits são implementados, eles têm uma fonte intrínseca de ruído devido a erros de fabricação, que não podem ser desprezados. Por isso, nesta tese nós estudamos como os efeitos causados pelas flutuações dos parâmetros físicos do qubit afetam o comportamento da fidelidade da computação, realizando com esse propósito a simulação da dinâmica de cadeias de spin pequenas desordenadas. A partir do análise exaustivo desse estúdio foi possível propor uma estratégia que permite aumentar a fidelidade considerando um sistema ruidoso. Por outro lado, motivados pelo interesse de obter critérios suficientes e necessários para satisfazer uma computação quântica adiabática e pelo fato que ainda não existe uma condição de adiabaticidade geral apesar de existir inúmeras propostas, nós apresentamos um novo critério que manifesta suficiência para sistemas mais gerais e finalmente apresentamos evidências de que tal condição seria um quantificador consistente.

Palavras-chave: Computação quântica. Teorema adiabático. Qubits supercondutores. Condições de adiabaticidade.

Abstract

VARGAS-GRAJALES, J. A. **Characterization of adiabatic evolution in spin chains.** 2018. 116 p. Thesis (Doctor in Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

Adiabatic quantum computation has its cornerstone in the adiabatic theorem, whose efficiency is traditionally related to the ratio of the Hamiltonian temporal variation that describes the system and the minimum gap between the ground state and the first excited state. Usually, this gap tends to decrease when the number of quantum resources (quantum bit: qubit) of a quantum processor increases, thus it requires slow variations of the Hamiltonian to ensure an adiabatic dynamic. Among the candidates for its physical implementation are the qubits superconducting circuit-based which have great potential because of their high control and promising scalability. However, when these qubits are implemented, they have an intrinsic source of noise due to manufacturing errors that can not be despised. Therefore, in this thesis we study how the effects caused by the fluctuations of the physical parameters of the qubit affect the behavior of the fidelity of the computation, accomplishing with this purpose the simulation of the dynamics of small disordered spin chains. From the exhaustive analysis of this studio, it was possible to propose a strategy that allows to increase the fidelity considering a noisy system. On the other hand, motivated by the interest of obtaining sufficient and necessary criteria to satisfy an adiabatic quantum computation and the fact that there is still no general adiabaticity condition despite there being numerous proposals, we present a new criterion that manifests sufficiency for more general systems and we finally presented evidence that such a condition would be a consistent quantifier.

Key-words: Quantum computing. Adiabatic theorem. Superconducting qubits. Adiabaticity conditions.

Lista de Figuras

- Figura 2.0.1 – No problema do caixeiro viajante, precisa-se encontrar a melhor rota possível, i.e., a rota que dê o menor custo de viagem. Se o caixeiro começa seu trajeto na cidade E e quer visitar todas as cidades: A, B, C, D e retornando a sua cidade inicial, ele em princípio pode fazer o caminho $E \rightarrow A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E$, ou $E \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E$, e assim por diante, existem em total 12 possíveis caminhos. Para esse exemplo simples o caminho ótimo é $E \rightarrow B \rightarrow D \rightarrow A \rightarrow C \rightarrow E$ com um custo de 10 passos. 30
- Figura 2.0.2 – Perfil do potencial de energia do enovelamento de uma proteína. Os mínimos representam possíveis configurações da estrutura da proteína, tal que o mínimo global está associado à estrutura enovelada correta da proteína. A existência de muitos mínimos locais faz com que encontrar a conformação funcional seja um problema computacionalmente complexo. . 31
- Figura 2.1.1 – Comparação entre AS e AQ-CQA. (a) A procura pelo mínimo global usando o AS é feito a partir de excitações térmicas. Enquanto, no caso dos protocolos quânticos AQ-CQA também se explora o tunelamento quântico. Se a barreira que separa duas configurações possíveis é o suficientemente alta, a probabilidade para obter uma nova configuração C' desde C a partir das excitações térmicas pode ser impossível se a temperatura não é suficiente. Não obstante, se a barreira é o suficientemente fina, a partir do tunelamento quântico pode-se atingir C' com alta probabilidade. (b) Para o caso de uma barreira quadrada de altura ΔE e largura w , uma partícula clássica em equilíbrio térmico consegue superar ela com uma probabilidade $e^{-\Delta E/k_B T}$, enquanto que uma partícula quântica conseguiria tunelar ela com uma probabilidade aproximada de $e^{-w\sqrt{\Delta E}/\Gamma}$ seguindo um protocolo quântico dado pela interpolação $H(t) = H_P + \Gamma(t)H_0$ 34

Figura 2.1.2 – Dinâmica tradicional dos autovalores de energia de um sistema de 8 qubits em função do tempo t , governado pelo Hamiltoniano $H(t) = A(t)H_0 + B(t)H_P$, tal que $A(t)$ e $B(t)$ são duas funções que permitem interpolar o Hamiltoniano inicial H_0 com o final H_P . Na região do gap mínimo entre o estado fundamental e primeiro excitado a dinâmica poderia em princípio ser descrita a partir da teoria de Landau-Zener. 39

Figura 2.1.3 – Dinâmica de níveis de um qubit, cujo Hamiltoniano é $H_{1Q}(t) = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\epsilon(t)}{2}\sigma_z$, onde $\Delta > 0$ e $\epsilon(t) \equiv |\alpha|t$. Se o qubit inicia sua dinâmica em $t = -\infty$, o estado fundamental é dado pelo autovetor de σ_z , $|\downarrow\rangle$. Durante a variação temporal do parâmetro ϵ , ele vai se tornando da ordem de Δ até o ponto de alcançar um “cruzamento evitado” e atingir o gap mínimo quando ϵ é nulo. Quando $\epsilon = 0$, o estado fundamental instantâneo é o autovetor de σ_x , $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$. Se continuamos variando ϵ até $t = \infty$, o sistema vai se manter no estado fundamental instantâneo $|\uparrow\rangle$ com uma probabilidade que é dada pela fórmula de Landau-Zener (2.1.12). As linhas tracejadas indicam os autovalores de H_{1Q} quando $\Delta = 0$, i.e. $E_{1,0}(t) = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\epsilon^2(t)} = \pm\frac{1}{2}|\alpha t|$ 41

Figura 2.1.4 – Dinâmica de um sistema de dois níveis a partir de uma perspectiva do potencial de poço duplo em função do parâmetro de controle $\epsilon(t)$. Se uma quase-partícula inicia sua dinâmica no poço mais profundo de (a), i.e., no estado fundamental, e se ϵ é modificado adiabaticamente é possível mantê-lo sempre no estado fundamental tal que no final da dinâmica (c) ele terá tunelado a barreira e agora se encontrará no fundo do outro poço. 42

Figura 3.1.1 – (a) Anel supercondutor no qual é aplicado um fluxo magnético sendo o fluxo total no anel quantizado como $\Phi = m\Phi_0$. (b) Esquema de uma junção Josephson, formada por dois supercondutores separados por um material não supercondutor (tradicionalmente um isolante) pelo qual tunelam pares de Cooper. 45

Figura 3.1.2 – Modelos de qubit de carga. (a) O mais simples constituído principalmente por uma CPB cuja única variável controlável é a voltagem V_g . (b) Para ter controle sobre a energia Josephson E_J^0 , é realizado um circuito mais complexo, substituindo o CPB por um anel interrompido por duas junções Josephson no qual é aplicado um fluxo externo Φ_x no interior dele. 50

- Figura 3.1.3 – Espectro energético do Hamiltoniano quando $E_J = 0$ em função da variável n_g . Nesse caso, cada parábola indica um estado de carga diferente, $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$ e os autoestados do Hamiltoniano seriam determinados pelas devidas combinações de estes estados de carga. 50
- Figura 3.1.4 – (a) Um anel interrompido por uma junção Josephson com um fluxo magnético Φ_x através dele consegue descrever o mais simples qubit de fluxo. (b) Para obter um controle maior sobre os qubit é substituída a junção por um novo anel interrompido por duas junções. 53
- Figura 3.1.5 – Modificação do potencial $U(\Phi) \equiv \frac{(\Phi - \Phi_x)^2}{2L} - E_J \cos\left(\frac{2\pi}{\Phi_0}\Phi\right)$ quando $\beta_L \equiv \frac{2\pi I_0 L}{\Phi_0} > 1$. Para diferentes valores do fluxo externo consegue-se ver as diferentes configurações pelas quais o sistema passa, indo de uma configuração estável quando $\Phi_x = 0$ (a), depois por uma biestável quando o fluxo externo está no ponto de degenerescência $\Phi_x = \Phi_0/2$ (b), e finalmente chega numa metaestável $\Phi_x = \Phi_0$ (c). 54
- Figura 3.1.6 – Desenho dos dois autoestados mais baixos de energia de um rf-SQUID no ponto de degenerescências $\epsilon = 0$. Perceba-se que o segundo estado excitado (linha azul clara tracejada) encontra-se muito afastado de $|g\rangle$ e $|e\rangle$, portanto se são aplicadas frequências $\sim \Delta$ pode-se garantir com muita certeza que o sistema se manterá entre $|g\rangle$ e $|e\rangle$ 55
- Figura 4.1.1 – Probabilidade de sucesso média $\bar{P}_S$ para ensembles de 1024 realizações, considerando a (a) h_i e (b) λ_i com a única variável aleatória. As probabilidades são mostradas como uma função do desvio padrão porcentual dos respectivos parâmetros. Para o nosso estudo foram considerados $\bar{\lambda}_i = \bar{h}_i = 5$ e $J = 2.5$. Os valores de $\bar{P}_S$ foram calculados para cada 2% de desvio, tal que as linhas somente são uma ajuda para entender o comportamento funcional de $\bar{P}_S$. Cada ponto preto indica a média de $\bar{P}_S$ considerando o conjunto total de 100 problemas analisados por cada valor de σ 60
- Figura 4.1.2 – Diferença da probabilidade de sucesso média quando os parâmetros h_i e λ_i flutuam com um 10% de desvio padrão no ensemble dos 100 problemas diferentes: $\bar{P}_{S,h} - \bar{P}_{S,\lambda}$ em função do tempo adimensional $s_{min} \equiv t_{min}/t_f$, tal que t_{min} é o instante no qual o gap mínimo aparece. A diferença tem uma notória dependência com a posição do gap mínimo, tal que se ele aparece “cedo” ou “tardamente” na computação, o valor de $\bar{P}_{S,h} - \bar{P}_{S,\lambda}$ será positivo ou negativo, respectivamente. 61

Figura 4.1.3 – Frequência de distribuição dos gaps mínimos quando o Δ_{min} da realização ideal aparece em (a) $t/t_f \equiv s = 0.259$, (b) $s = 0.289$ (c) $s = 0.674$ e (d) $s = 0.808$ para flutuações em λ_i (azul) e h_i (amarelo) de 10%. Se Δ_{min} aparece cedo no protocolo a amplitude da distribuição é maior no caso quando λ_i flutua que na situação quando h_i é uma variável aleatória. No entanto, se o gap mínimo aparece tardiamente nós encontramos o comportamento contrário, i.e., a amplitude da distribuição quando h_i flutua é maior que no caso λ_i aleatório. Para os casos, (a) e (d) H_P domina em s_{min} e temos que $\overline{P}_{S,h} - \overline{P}_{S,\lambda} < 0$, e pelo outro lado, para (b) e (c) H_0 é mais relevante que H_P na região de Δ_{min} , de modo que $\overline{P}_{S,h} - \overline{P}_{S,\lambda} > 0$. A linha tracejada indica o valor ideal do gap mínimo de cada problema. 63

Figura 4.2.1 – Δ_{min} do sistema (pontos azuis) e o tempo total do protocolo t_f (estrelas vermelhas) como uma função do tamanho das cadeias, N . A duração do protocolo t_f é escolhido para cada N de modo que a adiabaticidade é garantida com $\sim 99.9975\%$ de probabilidade. Quando o tamanho do sistema cresce é necessário um tempo maior para obter a mesma probabilidade, o qual está associado à redução do gap mínimo. 67

Figura 4.2.2 – Probabilidade da perda de sucesso média para um ensemble de 1024 realizações, considerando (a) λ_i , (b) h_i e (c) $J_{i,i+1}$ com a única variável aleatória até 10% no desvio padrão. Os resultados são mostrados para diferentes tamanhos do sistema ($N=2, 3, 4, 5, 6, 8$). 68

Figura 4.2.3 – Distribuição dos gaps mínimos Δ_{min} para ensembles com os parâmetros do sistema desordenados: λ_i (paneis a-c); h_i (paneis d-f); e $J_{i,i+1}$ (paneis g-i). Diferentes tamanhos do sistema são mostrados: $N = 2$ (a, d, g); $N = 3$ (b, e, h); $N = 5$ (c, f, i). A linha vertical azul denota o gap mínimo associado à realização ideal, enquanto que a linha vermelha mostra o valor de Δ_{min} médio do ensemble. Todos os ensembles têm 1024 realizações do sistema, cujas variáveis aleatórias têm um desvio padrão relativo do 10%. 69

Figura 5.0.1 – Efeitos da ressonância do sistema na fidelidade para manter o sistema no mesmo autoestado durante toda a evolução. (a) Nesse gráfico foi usado um valor de $\alpha \approx 0.06$, tal que a linha azul representa a situação do sistema em ressonância ($\omega = \Omega$) e a linha laranja quando está fora da ressonância ($\omega/\Omega = 10$) tal que o tempo total da dinâmica foi $t_f = 2\pi/(0.06\Omega)$ o que representa vários ciclos do caso fora da ressonância. (b) Comportamento da fidelidade mínima, $F_{min} = F_0(\pi/\lambda)$ em função de α e a razão entre ω e Ω , tal que fica em evidência que fora da ressonância e para valores pequenos de α a evolução é adiabática. Quando α começa ficar maior existe uma pequena perda de fidelidade mesmo para $\omega \gg \Omega$. Nesses casos foram considerados $\Omega = 2\pi \times 1700$ Hz e como condição inicial o estado fundamental instantâneo $|E_0(0)\rangle$ 73

Figura 5.0.2 – Comportamento da quantificador $C_2 = \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 \frac{\pi \sin \alpha}{\sqrt{1 + \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 - 2\frac{\omega}{\Omega} \cos \alpha}}$ em função da razão (ω/Ω) e α , mostrando que não é uma condição necessária de adiabaticidade pois apesar que o sistema apresenta um regime adiabático fora da ressonância, o quantificador C_2 é > 1 na maior parte destas regiões. 75

Figura 5.0.3 – Funcionalidade de C_3 em termos de α e a razão entre os parâmetros ω e Ω . Para o caso desse quantificador vemos como consegue ser uma condição suficiente pois sempre que o sistema apresentava uma dinâmica adiabática C_3 foi $\ll 1$. Quando o sistema entra em ressonância, a evolução deixa de ser totalmente adiabática tal que C_3 começa crescer rapidamente na região $\omega \approx \Omega$ 76

Figura 5.0.4 – Caracterização de C_4 em função de α e a relação entre ω e Ω . Esse quantificador resulta ser uma condição necessária de adiabaticidade pois na situação na qual o C_4 foi menor do que 1 o sistema tinha uma fidelidade de um. Vemos como C_4 cresce a medida que α e ω/Ω aumentam apesar que exista nessa região uma dinâmica quase adiabática. 77

Figura 5.1.1 – Comportamento do mínimo de probabilidade para manter o sistema no estado fundamental durante a dinâmica em função dos máximos das diferentes condições de adiabaticidade $\{C_1, C_2, C_3, C_4, C_p\}$, tal que $C_1 = C_3 = C_p$. Verificando assim que cada condição, inclusive a nossa, pode ser usada como quantificador para esse sistema. 85

Figura 5.1.2 – Dependência do mínimo de probabilidade por encontrar o sistema no estado excitado instantaneamente em função de C_p quando (a) $\omega/\Omega = 1 \times 10^{-4}$, (b) $\omega/\Omega = 1 \times 10^{-2}$, (c) $\omega/\Omega = 1 \times 10^{-1}$, (d) $\omega/\Omega = 1$ e (e) $\omega/\Omega = 10$. À medida que α é variado desde 0.001π até π o mínimo da probabilidade de sucesso decresce dependendo da relação entre ω e Ω , tal que nos casos com $\omega \ll \Omega$ a dinâmica é praticamente adiabática. 86

Figura 5.1.3 – Prova da característica biunívoca da condição C_p a partir do estudo do sistema descrito pelo Hamiltoniano (5.0.2) para distintos valores da relação ω/Ω . Encontrando que essa condição resulta ter um comportamento biunívoco e reafirmando assim sua consistência. 87

Figura 5.1.4 – Análise dos quantificadores C_3 e C_p quando é estudado um Hamiltoniano que proporciona valores diferentes para essas condições. Se é explorado um intervalo da evolução no qual existe uma fidelidade de quase 1 vemos que a condição C_3 apresenta valores que não são suficientemente baixos enquanto no caso de C_p vemos como ele é $\ll 1$ durante todo o intervalo de análise. . . 88

Figura 5.2.1 – Probabilidade de sucesso como uma função das condições de adiabaticidade C_i , considerando-se apenas os dois primeiros níveis, definidos em (5.0.3), (5.0.4), (5.0.5), (5.0.6) e (5.1.13) calculados para cada conjunto de 1024 realizações quando λ_i é desordenado cujas flutuações estão associadas a um desvio padrão de 10% para um sistema de 3 qubits. O C_i^{ideal} denota o valor máximo da figura de mérito para a realização ideal. As linhas tracejadas indicam os valores relacionados à realização ideal. 96

Figura 5.2.2 – Análise da adiabaticidade do sistema de 3 qubits fabricados no estado fundamental a partir do comportamento da condição de adiabaticidade $C_1(t)$ quando são considerados os efeitos a estados superiores. Nesse caso foram calculados para o primeiro e segundo estado excitado: C_1^{01} (preto) e C_1^{02} (vermelho) respectivamente, tal que para uma realização particular com λ_i flutuando com 10% de desvio padrão foi encontrado que C_1^{02} é $\geq C_1^{01}$ fazendo desse modo que uma análise à quantidade C_1^{01} não seja adequada para caracterizar a dinâmica adiabática do sistema. 97

Figura 5.2.3 – (a) Evolução da probabilidade de sucesso para manter o sistema no estado fundamental o qual é determinado pelo Hamiltoniano de três níveis (5.2.4). (b) Se é induzido que o sistema tenha uma maior probabilidade de popular o segundo estado excitado que o primeiro, encontramos que a condição C_p^{02} é muito maior que C_p^{01} , e relacionando a queda de probabilidade ao valor de C_p^{02} . É evidente que se tivéssemos analisado o valor de C_p^{01} o qual é $\ll 1$ deveríamos encontrar uma dinâmica praticamente adiabática, nos dando uma caracterização errada da dinâmica do sistema. Foram usados os valores de $\Delta_1 = 1/20$, $\Delta_2 = 3$, $\Gamma_0 = 10$, $\Gamma_1/\Gamma_0 = -0.5$ e $\Gamma_2/\Gamma_0 = -1.5$ 98

Figura A.0.1 – Gráfico da probabilidade $|\mu|^2$ em função do tempo. A linha roxa e azul foram feitas para os valores de $\theta = 1$ e $\theta = 0.05$ respectivamente, usando $\hbar = \omega_0 = m = 1$ 115

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 – Subconjunto de problemas que apresenta pelo menos uma realização física não robusta quando h_i flutua em 10%, tal que o problema com o maior número de realizações não robustas teve o maior $\overline{s_{min}}$. A listagem mostrada segue uma ordem decrescente da probabilidade dinâmica, revelando que nenhuma variável consegue ter uma funcionalidade biunívoca. Essas variáveis são o gap mínimo médio $\overline{\Delta_{min}}$, o desvio relativo do gap mínimo $\sigma_{\Delta_{min}}/\overline{\Delta_{min}}$, a média de $Q = \hbar \left \langle \phi_1(t_{min}) \dot{H}(t_{min}) \phi_0(t_{min}) \rangle \right / \min(E_1(t) - E_0(t))^2$, o desvio relativo de Q $\sigma_Q/\overline{Q}$, o tempo médio no qual aparece o gap mínimo $\overline{t_{min}}$ e o tempo médio relativo é definido como $\overline{s_{min}} = \overline{t_{min}}\alpha_j/\pi$ e α_j depende de cada problema j . As médias foram calculadas unicamente com as realizações robustas.	65
Tabela 4.2 – Dados da estratégia com o intuito de aumentar a probabilidade média por encontrar a solução do problema quando existem flutuações de 10% em h_i num ensemble de 1024 realizações. Nesse caso foi usado um problema que tinha 54 realizações física não robustas cujo gap mínimo médio aparecia perto do final do protocolo $\overline{s_{min}} = 0.803$, tal que a partir da redução dos valores de λ_i conseguiu-se atenuar os efeitos nocivos da aleatoriedade de h_i para assim aumentar consideravelmente a fidelidade do protocolo adiabático. Novamente, a média foi realizada considerando somente as realizações não robustas exceto no cálculo de $\overline{P_S}$ onde foi feita a média com o ensemble completo.	66

Sumário

1	INTRODUÇÃO	25
2	MÉTODOS QUÂNTICOS DE OPTIMIZAÇÃO	29
2.1	Optimização baseada em mecanismos quânticos	33
2.1.1	Teorema adiabático	34
2.1.2	<i>Annealing</i> Quântico & Computação Quântica Adiabática	38
3	QUBITS FÍSICOS PARA AQ E CQA	43
3.1	Qubits Supercondutores	44
3.1.1	Qubit de Carga	49
3.1.2	Qubit de Fluxo	52
4	DINÂMICA ADIABÁTICA EM CADEIAS FABRICADAS	57
4.1	Desordem nos parâmetros característicos	58
4.2	Cadeias de tamanho variável	66
5	CONDIÇÕES DE ADIABATICIDADE EM SISTEMAS NÃO DEGENERADOS	71
5.1	Proposta de uma nova condição de adiabaticidade	77
5.1.1	Dedução matemática	78
5.1.2	Exemplos	84
5.1.3	Consistência de C_p	88
5.2	Sistemas de múltiplos níveis	91
6	Conclusões	101
	Referências	102
	Apêndice A Oscilador Harmônico com frequência dependente do tempo	111

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Nas últimas duas décadas houve um grande esforço tanto teórico como experimental com o objetivo de conseguir criar modelos e construir sistemas físicos robustos que permitam o processamento quântico de informação. A razão por trás desse enorme esforço está associado com a procura por resolver certos tipos de problemas computacionais de uma maneira eficiente.

Um dos modelos quânticos introduzidos com a perspectiva de encarar uma classe de problemas de otimização é denominado *annealing* quântico (AQ) (1, 2), o qual permite encontrar com certa probabilidade a solução de um dado problema que possui um conjunto finito de soluções possíveis. No algoritmo do AQ são introduzidas altas flutuações quânticas no começo do protocolo com o propósito de conseguir explorar totalmente o espaço de soluções, e a medida que o algoritmo avança elas são reduzidas paulatinamente tendo como finalidade que o sistema possa convergir com alta probabilidade na solução do problema de interesse, cuja solução está tradicionalmente codificada no estado fundamental de um Hamiltoniano de *spin glass*. (3) O modelamento do AQ tem sua inspiração no recozimento de metais, tal que o papel das flutuações seria equivalente à temperatura a qual é submetido o metal e a solução do problema (estado fundamental do Hamiltoniano “problema”) à energia de cristalização do metal (energia mínima).

Por outro lado, posterior ao AQ nasceu a computação quântica adiabática (CQA) que permitiria encontrar com total certeza a solução a problemas de otimização, tal que a solução novamente estaria codificada no estado fundamental de um Hamiltoniano problema, H_P . (4, 5) Para esse caso, o protocolo consiste em criar uma interpolação entre H_P e um Hamiltoniano inicial H_0 , como por exemplo $H(t) = (1 - t/t_f)H_0 + t/t_f H_P$, de modo que o algoritmo é preparado no estado fundamental de H_0 , e com intuito de manter o sistema sempre no estado fundamental de $H(t)$, precisa-se “manipular adequadamente” os parâmetros

de controle do sistema para preservar-lhe sempre nesse autoestado até o final da evolução, garantindo dessa maneira atingir a resposta do problema codificada no estado fundamental de H_P .

A manipulação adequada faz referência a realizar uma modificação temporal do Hamiltoniano $H(t)$ seguindo o teorema adiabático, o qual é o responsável de permitir que o sistema esteja no estado fundamental em cada instante durante o protocolo (6), de tal maneira que se fosse satisfeita a condição (7),

$$\max_{t \in [0, t_f]} \left[\hbar \left| \frac{\langle E_1(t) | \dot{H} | E_0(t) \rangle}{\Delta_{10}^2(t)} \right| \right] \ll 1, \quad (1.0.1)$$

então uma medição do estado final proporcionaria uma solução do problema com alta probabilidade de sucesso, tal que $|E_n(t)\rangle$ são os autoestados instantâneos de $H(t)$ com autovalores respectivos $E_n(t)$, e $\Delta_{10}(t) \equiv E_1(t) - E_0(t)$ é o gap entre os estados instantâneos fundamental e o primeiro excitado. Apesar que existem diversos critérios de adiabaticidade (8–11), a relação (1.0.1) aparece na grande maioria dos trabalhos como a condição tradicional de adiabaticidade, pelo fato que nenhum deles, incluindo o tradicional, tem conseguido mostrar ser suficiente e necessário para um caso geral. (12) Essa controvérsia atraiu nossa atenção, incentivando que nessa tese fosse proposto um novo critério de adiabaticidade cuja validade foi verificada para vários sistemas, mostrando que nosso quantificador de adiabaticidade está mais próximo de ser um critério universal que os outros.

Em virtude de ser o AQ e a CQA dois poderosos métodos de otimização, os quais permitem teoricamente encontrar soluções a problemas de alta dificuldade, durante os últimos anos tem se explorado uma ampla diversidade de sistemas físicos para implementar eles, como por exemplo a partir de spins nucleares (13–15), átomos neutros aprisionados (16) e junções Josephson. (17, 18) Em todos esses casos foi codificada a informação num sistema de dois níveis (qubit) onde seria possível uma manipulação conveniente, leitura, escalabilidade e proteção de erros devido ao ambiente para obter um ótimo computador quântico. Não obstante, construir esse tipo de computador é um verdadeiro desafio, pois para obter um alto rendimento computacional deve ser possível controlar um alto número de qubits, de modo que o problema de escalabilidade e controle têm impedido a construção de máquinas quânticas de muitos qubits (> 10) baseados na maioria das diferentes implementações físicas.

Desse modo, durante a construção e manipulação dos dispositivos quânticos surgem múltiplos problemas, e um deles manifesta-se por causa da imperfeição da sua fabricação, fazendo com que a probabilidade com a qual conseguiria se encontrar a resposta do problema de interesse seja reduzida. Essa dificuldade que aparece nos motivou a realizar um estudo dinâmico dos efeitos dos erros de manufatura, conduzindo essa análise na proposta de um método para

aumentar a probabilidade de encontrar a solução do problema.

Essa tese está distribuída da seguinte maneira:

- No capítulo 2 se realiza uma introdução e contextualização aos métodos de otimização que usam ferramentas quânticas, como são o annealing quântico e a computação quântica adiabática. Nesse capítulo é introduzido o teorema adiabático com o objetivo de entender sua relevância nesse tipo de métodos quânticos.
- Posteriormente, no capítulo 3 são discutidos brevemente alguns sistemas físicos, os quais são candidatos para uma máquina que conseguiria implementar algoritmos de CQA e AQ. Focamos especificamente nos sistemas baseados em circuitos supercondutores por causa de sua atual relevância e pelo fato de apresentar a melhor escalabilidade entre as diversas implementações físicas, fazendo desse modo um aprofundamento nos qubits supercondutores de carga e de fluxo.
- Logo, no capítulo 4 apresentamos uma análise de uma cadeia de vários qubits submetidos a erros estáticos nos campos transversal e longitudinal, individualmente. Isso, com o objetivo de entender como a probabilidade de sucesso de uma dinâmica adiabática é afetada por esses erros.
- No quinto capítulo são discutidos vários critérios de adiabaticidade dos quais alguns não resultam ser quantificadores para certos sistemas específicos. No entanto, é proposta uma nova condição de adiabaticidade que permite estar mais próximo de uma condição universal. Desse modo, nós verificamos a validade e realizamos comparações de múltiplos critérios com o nosso quantificador para alguns sistemas quânticos.
- Por fim, o capítulo de conclusões apresentam as nossas considerações finais e delineamos algumas perspectivas a serem seguidas após este trabalho.

Capítulo 2

MÉTODOS QUÂNTICOS DE OPTIMIZAÇÃO

Em teoria da informação, resolver um problema de maneira eficiente significa que a quantidade de recursos usados no processamento cresce de maneira polinomial (ou quase-polinomial) com o tamanho do problema. Em outras palavras, quando é usado um algoritmo e os recursos necessários para encontrar a solução são da ordem, por exemplo, de $\mathcal{O}(n^p)$ (onde $p > 1$ e n é o tamanho do problema), dizemos que o algoritmo é eficiente¹. Por outro lado, quando o uso de recursos para obter a solução aumenta rapidamente com n , por exemplo como $O(c^n)$ ($c > 1$) ou $O(n!)$, esse algoritmo é chamado a ser ineficiente. (19)

Dessa forma, permitamos definir uma classe de problemas os quais conseguem ser resolvidos por um algoritmo polinomial não determinístico, a qual é conhecida como *problemas NP*. (20) Nesta classe estão contidos diversos problemas de procura e de otimização nos quais deseja-se saber se existe uma solução ou em alguns casos uma melhor solução às atualmente conhecidas. Entre esses problemas da classe NP está o de fatoração de um número inteiro, tal que usando o melhor algoritmo clássico determinístico o uso de recursos cresce exponencialmente, entretanto, usando um algoritmo quântico esse crescimento é polinomial. (21)

No caso dos problemas de otimização se realiza um mapa a uma função que deseja-se extremizar, a qual é conhecida como função de custo ou objetivo e deve-se encontrar um vetor que satisfaz um conjunto de restrições e que permita obter a solução ótima do problema. (3, 22–25)

O exemplo clássico de otimização (de variáveis discretas) do tipo NP, é o problema do caixeiro viajante, no qual é dada uma lista de N cidades e deve-se planejar a melhor rota

¹ Quando os recursos necessários num algoritmo para obter uma solução dependem com n como $O(n^q \log n)$ (quase-polinomial), e $q \in \mathbb{R}$ também é chamado a ser eficiente o algoritmo. (19)

Figura 2.0.1 – No problema do caixeiro viajante, precisa-se encontrar a melhor rota possível, i.e., a rota que dê o menor custo de viagem. Se o caixeiro começa seu trajeto na cidade E e quer visitar todas as cidades: A , B , C , D e retornando a sua cidade inicial, ele em princípio pode fazer o caminho $E \rightarrow A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E$, ou $E \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E$, e assim por diante, existem em total 12 possíveis caminhos. Para esse exemplo simples o caminho ótimo é $E \rightarrow B \rightarrow D \rightarrow A \rightarrow C \rightarrow E$ com um custo de 10 passos.

Fonte: Elaborada pelo autor

para minimizar o custo total da viagem, tal que o caixeiro deve passar por cada cidade uma única vez e retornar à cidade inicial de partida como é mostrado na Fig. 2.0.1. Se pretende-se resolver esse problema exatamente por busca exaustiva² seria necessário analisar $(N - 1)!/2$ rotas possíveis, mostrando assim, que o tempo de execução seria $\mathcal{O}(N!)$, ou seja, um método ineficiente. Contudo, um dos melhores métodos que resolve esse problema exatamente é o algoritmo de Held–Karp, cujo tempo de procura pela resposta cresce como $N^2 2^N$ (26), i.e., um comportamento também ineficiente.

Outro exemplo de grande interesse que entra na categoria de problemas NP, consiste em encontrar a conformação funcional de uma proteína, ou seja, a estrutura necessária para ela realizar sua função biológica desejada. (23, 27–29) Essa conformação funcional está associada com o mínimo de energia livre de Gibbs, e o processo que a proteína realiza até alcançar sua estrutura ativa é denominado enovelamento (*protein folding*) e pode ser explicado a partir do perfil do potencial de energia (ou *landscape* de energia) onde deve-se encontrar a configuração associada ao mínimo global, como é representado na Fig. 2.0.2. Encontrar a estrutura da proteína enovelada resulta ser uma tarefa realmente difícil pois o número de mínimos locais no perfil do potencial é enorme, fazendo que seja altamente provável cair num mínimo que não seja o global (estrutura incorreta) quando usa-se um algoritmo para solucionar esse problema.

Durante o percurso dos anos, múltiplos algoritmos foram desenvolvidos para resolver de maneira tanto exata como aproximada problemas NP de otimização (discreta e contínua), usando desde teoria dos grafos (31), redes neurais artificiais (32), e outros. Entre os

² É um método de solução que consiste em enumerar todas as possíveis soluções e checar cada uma com o fim de saber se ela satisfaz o enunciado do problema.

Figura 2.0.2 – Perfil do potencial de energia do enovelamento de uma proteína. Os mínimos representam possíveis configurações da estrutura da proteína, tal que o mínimo global está associado à estrutura enovelada correta da proteína. A existência de muitos mínimos locais faz com que encontrar a conformação funcional seja um problema computacionalmente complexo.

Fonte: RADFORD. (30)

diversos métodos, existem vários fundamentados em mecanismos físicos para encarar esse tipo de problema, como por exemplo, o *Simulated annealing* (AS) ³, o annealing quântico (AQ) e a computação quântica adiabática (CQA), os quais usam processos muito lentos e repetitivos para convergir com alta probabilidade na solução do problema pleiteado. (1, 4, 33)

Nesse documento, estaremos interessados principalmente nos métodos de AQ e CQA, pelo fato das grandes expectativas que se têm para resolver alguns problemas do tipo NP mais eficientemente que usando estratégias clássicas. (1, 34–36) Nessa ordem de ideias, antes de introduzir os métodos quânticos de otimização permitamos entender a ideia geral do funcionamento do annealing simulado (AS).

O protocolo do AS é motivado pelo processo de recozimento de metais ou também chamado de recristalização, no qual o material é aquecido a uma temperatura suficientemente alta (um pouco menor que a temperatura de fusão) tal que nessa etapa os átomos do sistema conseguem se deslocar facilmente. Posteriormente, começa um processo de esfriamento controlado o qual é feito lentamente com o objetivo de reduzir os defeitos do material. No final do processo quando a temperatura é suficientemente baixa é esperado conseguir um cristal perfeito. A perfeição do material está associada à sua energia interna, de maneira que se é obtido um cristal perfeito o sistema estará no mínimo (global) de energia.

Usando essa inspiração, o AS foi proposto para encontrar com certa probabilidade o mínimo global de uma função de custo $E(\vec{x})$ a partir de uma inspeção controlada. Em geral, essa função possui muitos mínimos locais, tal que, por exemplo, no caso do problema de enovelamento de proteínas $E(\vec{x})$ é traduzida como a energia livre de Gibbs da molécula.

³ Cujá tradução literal seria recozimento simulado, mas nesse texto usaremos o termo annealing simulado ou clássico.

Para esse exemplo, os mínimos locais seriam estruturas funcionais incorretas, enquanto o mínimo global estaria associado a sua conformação biológica funcional, e as barreiras que separam cada mínimo representariam a energia necessária para atingir uma nova conformação da proteína.

O algoritmo de AS é iniciado escolhendo uma condição inicial dada por uma configuração aleatória C_i associada a um mínimo local, além disso é definido o parâmetro $\tilde{T}$ que permitirá realizar a procura da solução do problema através de todo o espaço de configurações. Esse parâmetro mimica a temperatura no processo de recozimento, pois no começo do protocolo possui um valor muito alto e a medida que é rodado o algoritmo, é reduzido paulatinamente seguindo um esquema temporal predefinido⁴. O papel de $\tilde{T}$ aparece quando é calculado e comparado o custo com uma configuração vizinha, C_j , de maneira que se a diferença de custo $E(C_j) - E(C_i) \equiv \Delta E_{ij}$ é ≤ 0 o sistema sempre adquire a nova configuração, e se $\Delta E_{ij} > 0$, o sistema terá a nova configuração com uma probabilidade de aceitação dada por $p(\Delta E_{ij}, \tilde{T}) = e^{-\Delta E_{ij}/\tilde{T}}$. (33, 38) Portanto, pelo fato que no início do AS a temperatura artificial $\tilde{T}$ é o suficientemente alta, qualquer configuração é igualmente acessível, isso permitirá fazer explorações globais do espaço de soluções, tal que, nessa etapa do algoritmo ele comporta-se como um método de busca aleatória simples.

Com o transcorrer do protocolo, $\tilde{T}$ vai reduzindo-se tal que para valores baixos apenas são aceitas transições para soluções com $\Delta E_{ij} \leq 0$, i.e., melhores soluções. Se o tempo do experimento fosse infinito teríamos probabilidade unitária de obter o mínimo global (solução do problema) (37), mas pelo fato que é realizado o protocolo num tempo finito, existe uma probabilidade $p < 1$ de atingir a resposta, portanto se são mantidas as mesmas condições iniciais e realizando o experimento muitas vezes, o erro do protocolo por encontrar a solução será reduzido.

Por um lado, uma das dificuldades nesse método aparece quando a função de custo do problema de otimização possui altas barreiras separando configurações vizinhas, exigindo incluir uma temperatura inicial muito alta, obrigando a realizar um protocolo mais prolongado para obter com alta probabilidade a solução. Por outro lado, um elemento adicional que incrementa a dificuldade para encontrar a solução do problema é dado a partir do número de mínimos locais da função de custo, levando a que seja necessário realizar uma procura mais extensa. Dessa forma, a eficiência do algoritmo estará totalmente relacionada tanto com o número de mínimos locais como com o tamanho das barreiras que separam eles.

⁴ A dependência temporal de $\tilde{T}$ normalmente é $\sim 1/\log t$. (37)

2.1 Optimização baseada em mecanismos quânticos

Agora, vamos introduzir os métodos de optimização usando elementos quânticos. Para compreender eles, permitamos escrever uma função de custo $E(\vec{x})$ que deseja-se optimizar como uma soma linear e quadrática de variáveis binárias x_i (39, 40),

$$E(\vec{x}) = -\sum_{i=1}^N h_i x_i + \sum_{i<j} J_{ij} x_i x_j, \quad (2.1.1)$$

tal que os parâmetros h_i e J_{ij} são quantidades constantes que dependem das condições do problema e $x_i \in \{-1, 1\}$ (ou em algumas situações $x_i \in \{0, 1\}$). A função $E(\vec{x})$ pode-se reescrever como o Hamiltoniano de um sistema de partículas de spin 1/2 interagentes, a partir do mapa $x_i \rightarrow \sigma_i^z$, obtendo dessa maneira (40),

$$H_P = -\sum_{i=1}^N h_i \sigma_i^z + \sum_{i<j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (2.1.2)$$

onde σ^z é uma matriz de Pauli com autovalores ± 1 , i.e., os mesmos valores que pode adquirir x_i . Dessa maneira encontrar o estado fundamental de (2.1.2) resolveria o problema de optimização. No entanto, foi demonstrado que encontrar esse estado fundamental é equivalente a solucionar o problema do caixeiro viajante, i.e., não é possível encontrar esse específico autoestado num tempo polinomial em relação ao tamanho da cadeia de spins. (3)

Um método alternativo para resolver esse problema é dado a partir dos protocolos de optimização: *annealing quântico* (AQ), o qual mimica o AS a partir do uso de características quânticas (1), e um caso específico do AQ denominado *computação quântica adiabática* (CQA), proposta por Farhi e colaboradores. (4, 5) Em ambos algoritmos é introduzido um Hamiltoniano fácil⁵ H_0 que não comuta com o Hamiltoniano problema H_P tal que no início de suas respectivas dinâmicas são descritas somente por H_0 , e à medida que o sistema evolui, H_0 vai se tornando menos relevante que H_P , fazendo que no final do protocolo o Hamiltoniano que descreve ao sistema seja H_P .

Nesta ordem de ideias, nós estamos interessados em obter o estado fundamental de H_P , $|g_P\rangle$, onde está codificada a solução do problema de optimização. Portanto, usando as técnicas de AQ e CQA, as quais serão estudadas mais a fundo depois, devem-se iniciar os algoritmos no estado fundamental de H_0 , $|g_0\rangle$, e seguindo uma dinâmica controlada pode-se garantir com altíssima probabilidade encontrar a resposta do problema proposto. No caso da

⁵ Quando se diz que é um Hamiltoniano fácil, é no sentido que o espectro é conhecido e sua implementação física facilmente realizável.

Figura 2.1.1 – Comparação entre AS e AQ-CQA. (a) A procura pelo mínimo global usando o AS é feito a partir de excitações térmicas. Enquanto, no caso dos protocolos quânticos AQ-CQA também se explora o tunelamento quântico. Se a barreira que separa duas configurações possíveis é o suficientemente alta, a probabilidade para obter uma nova configuração C' desde C a partir das excitações térmicas pode ser impossível se a temperatura não é suficiente. Não obstante, se a barreira é o suficientemente fina, a partir do tunelamento quântico pode-se atingir C' com alta probabilidade. (b) Para o caso de uma barreira quadrada de altura ΔE e largura w , uma partícula clássica em equilíbrio térmico consegue superar ela com uma probabilidade $e^{-\Delta E/k_B T}$, enquanto que uma partícula quântica conseguiria tunelar ela com uma probabilidade aproximada de $e^{-w\sqrt{\Delta E}/\Gamma}$ seguindo um protocolo quântico dado pela interpolação $H(t) = H_P + \Gamma(t)H_0$.

Fonte: RAJAK; CHAKRABARTI. (41)

CQA essa dinâmica está vinculada tradicionalmente à relação entre a variação temporal do Hamiltoniano total e o gap entre o estado fundamental e excitado, a qual deve ser muito pequena, e é fundamentada pelo teorema adiabático, tal que o sucesso dessa técnica dependerá se é satisfeita a condição de adiabaticidade imposta por dito teorema. Portanto, permitamos entrar em detalhes nesse teorema essencial para o entendimento da CQA.

2.1.1 Teorema adiabático

Esse teorema é a pedra fundamental do AQ, e foi estabelecido desde os primórdios da mecânica quântica (6, 42), o qual afirma que se considerarmos um sistema quântico cuja dinâmica é descrita pelo Hamiltoniano $H(t)$, tal que no início da evolução encontrasse no m -ésimo autoestado de $\hat{H}(0)$, $|E_m(0)\rangle$, e além disso é realizada uma evolução o “suficientemente lenta”, no final da evolução se atingiria o m -ésimo autoestado de $\hat{H}(t_f)$, $|E_m(t_f)\rangle$. Em termos matemáticos podemos escrever o resultado do teorema como,

$$|\langle E_n(T) | \hat{U}_A(t_f, 0) | E_m(0) \rangle|^2 = \delta_{mn}. \quad (2.1.3)$$

onde $\hat{U}_A$ é o operador de evolução temporal tal que $i\hbar\partial_t\hat{U}_A(t, 0) = H(t)\hat{U}_A(t, 0)$

Para demonstrar este teorema, na sua forma tradicional, permitamos partir da equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (2.1.4)$$

a qual descreve a dinâmica do estado global do sistema $|\Psi(t)\rangle$. Por outro lado, instantaneamente $\hat{H}(t)$ satisfaz a equação de autovalores,

$$\hat{H}(t) |E_n(t)\rangle = E_n(t) |E_n(t)\rangle, \quad (2.1.5)$$

onde $\{|E_n(t)\rangle\}$ representa a base ortonormal instantânea de $\hat{H}(t)$, com $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] \neq 0$ em geral e ademais é assumido um espectro não degenerado⁶. Dessa forma o estado global do sistema pode ser escrito como uma combinação linear da base instantânea, i.e,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')} |E_n(t)\rangle.$$

Logo, substituindo $|\Psi(t)\rangle$ em (2.1.4), vemos que

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \left(\dot{c}_n(t) |E_n(t)\rangle - \frac{i}{\hbar} c_n(t) E_n(t) |E_n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{E}_n(t)\rangle \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')} \\ = \sum_n c_n(t) \times e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')} \hat{H}(t) |E_n(t)\rangle, \end{aligned}$$

onde $|\dot{E}_n(t)\rangle \equiv \partial_t |E_n(t)\rangle$. Agora, projetando sobre $\langle E_m(t)|$, conseguimos,

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\dot{c}_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(t')} - \frac{i}{\hbar} c_m(t) E_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(t')} + \sum_n c_n(t) \langle E_m(t) | \dot{E}_n(t) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')} \right) \\ = E_m(t) c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(t')}, \end{aligned}$$

tal que

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \langle E_m(t) | \dot{E}_n(t) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E_n(t') - E_m(t'))}.$$

⁶ Em situações com espectros degenerados já não seria possível falar em termos de um autoestado instantâneo específico, nesse caso se a evolução é adiabática o sistema se manteria num subespaço de Hilbert cuja base são os autoestados instantâneos degenerados.

Reescrevendo $\langle E_m | \dot{E}_n \rangle$ a partir da derivaão de (2.1.5) tem-se que,

$$\langle \dot{H}(t) | E_n(t) \rangle + \langle \hat{H}(t) | \dot{E}_n(t) \rangle = \langle \dot{E}_n(t) | E_n(t) \rangle + \langle E_n(t) | \dot{E}_n(t) \rangle,$$

e projetando sobre $\langle E_m(t) |$ a expresso para $m \neq n$ fica como,

$$\begin{aligned} \langle E_m(t) | \dot{H}(t) | E_n(t) \rangle + E_m(t) \langle E_m(t) | \dot{E}_n(t) \rangle &= \langle \dot{E}_n(t) | E_m(t) | \dot{E}_n(t) \rangle, \\ \langle E_m(t) | \dot{E}_n(t) \rangle &= \frac{\langle E_m(t) | \dot{H}(t) | E_n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}, \end{aligned}$$

e para o caso $m = n$, temos que $\frac{\partial}{\partial t} \langle E_m(t) | E_m(t) \rangle = 0$, pelo fato que  uma base normalizada, encontrando que,

$$\begin{aligned} \langle \dot{E}_m(t) | E_m(t) \rangle + \langle E_m(t) | \dot{E}_m(t) \rangle &= 0 \\ 2\Re \langle E_m(t) | \dot{E}_m(t) \rangle &= 0, \end{aligned}$$

quer dizer que $\langle E_m | \dot{E}_m \rangle \in \Im$, e dessa forma

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle E_m(t) | \dot{E}_m(t) \rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle E_m(t) | \dot{H}(t) | E_n(t) \rangle}{\Delta_{nm}(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \Delta_{nm}(t')}.$$

onde escrevermos $\Delta_{nm}(t) = E_n(t) - E_m(t)$. Se agora definimos $\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t dt' \langle E_m(t') | \dot{E}_m(t') \rangle$ (fase geométrica) obtemos que,

$$e^{i\gamma_m(t)} \frac{\partial}{\partial t} (c_m(t) e^{-i\gamma_m(t)}) = - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle E_m(t) | \dot{H}(t) | E_n(t) \rangle}{\Delta_{nm}(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \Delta_{nm}(t')}. \quad (2.1.6)$$

Introduzindo o tempo normalizado $s \equiv t/t_f$ tal que $s \in [0, 1]$ e integrando (2.1.6) temos que,

$$c_m(s) e^{-i\gamma_m(s)} = c_m(0) - \sum_{n \neq m} \int_0^s ds' \frac{F_{nm}(s')}{\Delta_{nm}(s')} e^{-\frac{i}{\hbar} t_f \int_0^{s'} ds'' \Delta_{nm}(s'')}, \quad (2.1.7)$$

onde $F_{nm}(s) \equiv c_n(s) \langle E_m(s) | \frac{d\hat{H}(s)}{ds} | E_n(s) \rangle e^{-i\gamma_m(s)}$. Logo, o integrando de (2.1.7) pode-se es-

crever como,

$$\begin{aligned} \frac{F_{nm}(s')}{\Delta_{nm}(s')} e^{-\frac{i}{\hbar} t_f \int_0^{s'} ds'' \Delta_{nm}(s'')} &= \frac{i\hbar}{t_f} \left[\frac{d}{ds'} \left(\frac{F_{nm}(s')}{\Delta_{nm}^2(s')} e^{-\frac{i}{\hbar} t_f \int_0^{s'} ds'' \Delta_{nm}(s'')} \right) \right. \\ &\quad \left. - e^{-\frac{i}{\hbar} t_f \int_0^{s'} ds'' \Delta_{nm}(s'')} \frac{d}{ds'} \left(\frac{F_{nm}(s')}{\Delta_{nm}^2(s')} \right) \right], \end{aligned}$$

portanto,

$$\begin{aligned} c_m(s) e^{-i\gamma_m(s)} &= c_m(0) - \frac{i\hbar}{t_f} \sum_{n \neq m} \left[\frac{F_{nm}(s)}{\Delta_{nm}^2(s)} e^{-\frac{i}{\hbar} t_f \int_0^s ds' \Delta_{nm}(s')} - \frac{F_{nm}(0)}{\Delta_{nm}^2(0)} \right. \\ &\quad \left. - \int_0^s ds' e^{-\frac{i}{\hbar} t_f \int_0^{s'} ds'' \Delta_{nm}(s'')} \frac{d}{ds'} \left(\frac{F_{nm}(s')}{\Delta_{nm}^2(s')} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Assume-se que $\frac{d}{ds'} \left(\frac{F_{nm}(s')}{\Delta_{nm}^2(s')} \right)$ é integrável no intervalo $[0, s]$, portanto a partir do lema de Riemann-Lebesgue o último termo de (2.1.8) é nulo no limite $t_f \rightarrow \infty$ devido às rápidas oscilações do integrando. (43) Dessa forma, conseguiríamos manter o sistema no m -ésimo autoestado se (43),

$$\frac{\max_{s \in [0,1]} |F_{nm}(s)|}{\hbar \min_{s \in [0,1]} \{\Delta_{nm}^2(s)\}} \ll t_f, \quad \forall n, m.$$

ou a partir da condição (tradicional⁷) de adiabaticidade,

$$\max_{t \in [0, t_f]} \hbar \left| \frac{\langle E_m(t) | \frac{d\hat{H}(s)}{dt} | E_n(t) \rangle}{\Delta_{nm}^2(t)} \right| \ll 1, \quad \forall n, m. \quad (2.1.9)$$

Este requisito indica que deve-se realizar uma mudança temporal do Hamiltoniano o suficientemente pequena em comparação à diferença de energia associada aos autoestados $|E_n\rangle$ e $|E_m\rangle$ para garantir manter o sistema no mesmo autoestado durante toda a dinâmica como prediz o teorema⁸. Portanto, se o gap energético Δ_{nm} é muito pequeno seria necessário realizar uma variação do Hamiltoniano muito lenta obrigando fazer uma evolução mais prolongada, ou seja $t_f \rightarrow \infty$. Por essa razão, torna-se necessário estudar o comportamento do valor mínimo que pode alcançar Δ_{nm} durante a evolução para assim impor a mudança

⁷ Esta afirmação tradicional do teorema adiabático pode falhar por conta da existência de Hamiltonianos com espectros degenerados (44) e de transições ressonantes entre níveis de energia (7, 12), exigindo dessa maneira novas condições para garantir uma dinâmica adiabática.

⁸ Com o intuito de exemplificar o teorema adiabático no Apêndice A estudamos o caso de um oscilador harmônico com frequência dependente do tempo.

adequada do Hamiltoniano para satisfazer esta aproximao.

2.1.2 *Annealing* Quntico & Computao Quntica Adiabtica

Como j foi mencionado, existe uma sutil diferena entre o AQ e a CQA que pode acarretar vrias consequncias. No AQ, o sistema pode-se encontrar em contato com um banho trmico permitindo dessa maneira que existam excitaes trmicas e que sob certas condies esse banho pode ter um papel realmente importante como assistente para aumentar a probabilidade de sucesso do algoritmo como demonstrado por Amin e colaboradores. (45) Enquanto isso, na CQA o sistema de interesse isolado, cuja caracterstica garante que teoricamente o sistema sempre se mantenha no estado fundamental instantneo, a diferena do AQ no qual o sistema pode mover-se atravs de diferentes estados durante o protocolo mas deve se garantir que retorne no final do protocolo ao estado fundamental. Por outro lado, a CQA no est restrita somente a problemas de optimizao como na situao do AQ, pois foi demonstrado que a CQA uma computao universal polinomialmente equivalente computao de circuito. (46, 47)

Agora, permitamos descrever mais detalhadamente a estratgia por trs dos protocolos qunticos adiabticos: AQ e CQA. Para isso, pode-se realizar uma interpolao entre o Hamiltoniano inicial, $\hat{H}_0$ e o Hamiltoniano final, $\hat{H}_P$ (definido em (2.1.2)), como se segue,

$$\hat{H}(t) = A(t)\hat{H}_0 + B(t)\hat{H}_P, \quad (2.1.10)$$

tal que, como j foi dito, os Hamiltonianos inicial e final satisfazem $[\hat{H}_0, \hat{H}_P] \neq 0$ e alm disso as funes $A(t)$, $B(t)$ no incio da evoluo se relacionam como $A(0) \gg B(0)$ e no final do protocolo $A(t = t_f) \ll B(t = t_f)$.

Tradicionalmente, escolhido o Hamiltoniano inicial a ser $\hat{H}_0 = -\sum_{i=1}^N \sigma_x^i$, cuja escolha feita por causa que seu estado fundamental $|\phi_0(0)\rangle \equiv |g_0\rangle$ no degenerado e mimica a condio inicial do annealing clssico, i.e., todas as possveis configuraes que o sistema pode alcanar, so igualmente acessveis. Para deixar mais claro, se escrevemos $|g_0\rangle$ na base de σ_z^i , $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ teramos,

$$\begin{aligned} |g_0\rangle &= \otimes_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i) \\ &\equiv \otimes_{i=1}^N |\rightarrow\rangle_i, \end{aligned}$$

onde vemos que o estado fundamental inicial o produto dos estados fundamentais individuais cujo autovalor $-N$. Agora, depois de ser definido o estado inicial deve-se realizar uma evoluo que permita, no caso da CQA, instantaneamente sempre manter o sistema no estado

Figura 2.1.2 – Dinâmica tradicional dos autovalores de energia de um sistema de 8 qubits em função do tempo t , governado pelo Hamiltoniano $H(t) = A(t)H_0 + B(t)H_P$, tal que $A(t)$ e $B(t)$ são duas funções que permitem interpolar o Hamiltoniano inicial H_0 com o final H_P . Na região do gap mínimo entre o estado fundamental e primeiro excitado a dinâmica poderia em princípio ser descrita a partir da teoria de Landau-Zener.

Fonte: Elaborada pelo autor

fundamental até atingir a solução codificada em $|\phi_0(t_f)\rangle \equiv |g_P\rangle$, e no caso de AQ estar próximo do estado fundamental instantâneo, e no final do protocolo atingir $|g_P\rangle$.

A partir da análise da dinâmica de níveis do sistema, há regiões nas quais o gap energético entre o estado fundamental $E_0(t)$ e o primeiro excitado $E_1(t)$ é muito pequena tal como pode ser observado na Fig. 2.1.2. Nessas regiões, a probabilidade de sair do estado fundamental é apreciável e possuir um conhecimento detalhado do gap mínimo,

$$\Delta_{min} \equiv \min_{0 \leq t \leq t_f} (E_1(t) - E_0(t)),$$

permitiria saber como manipular a dinâmica do sistema para garantir adiabaticidade, lembrando que isto requer a capacidade de se determinar o autoestado de menor energia para todo instante de tempo, o qual seria tão difícil como resolver o problema de interesse. Para os protocolos mais simples, nos quais são usadas funções de interpolação $A(t)$ e $B(t)$ cuja taxa de tempo é constante, conhece-se que a duração do protocolo que garante uma evolução adiabática depende do Δ_{min} como $\mathcal{O}(\Delta_{min}^{-2})$. (4, 45) No entanto, é conhecido que a dependência do tempo da computação pode ser atenuado e obter a forma $\mathcal{O}(\Delta_{min}^{-1})$ (48), se protocolos mais sofisticados, baseados em interpolações adaptativas, são usados.

Adicionalmente, tem sido encontrado que o gap mínimo diminui rapidamente com o tamanho do problema ($\Delta_{min} \sim e^{-f(N)}$). (49, 50) Isso significaria que quando o número de variáveis do problema é muito grande obriga realizar uma computação prolongada para obter com alto sucesso a solução do problema.

Vemos dessa forma que a dinmica na vizinhana do gap mnimo determina a eficincia dos protocolos qunticos: o AQ e a CQA. Nessa regio, em geral, possvel realizar uma aproximao e descrever a dinmica do sistema a partir dos nveis mais baixos de energia. Essa aproximao vivel sempre e quando se manipulem frequncias que tornem impossvel excitar o sistema at os prximos estados energticos. Baseado nessa aproximao, a dinmica pode ser representada a partir do Hamiltoniano de um sistema de dois nveis ou como chamado tradicionalmente na literatura: *qubit* ou bit quntico (51), i.e.,

$$H_{TLS}(t) = -\frac{\Delta(t)}{2}\sigma_x - \frac{\epsilon(t)}{2}\sigma_z \quad (2.1.11)$$

onde Δ e ϵ so conhecidos como o *tunneling splitting* e a frequncia de transio, respectivamente, cujos autovalores do H_{TLS} so $E_{1,0}(t) = \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2(t) + \epsilon^2(t)} \equiv \pm \frac{\nu(t)}{2}$. Quando por exemplo escolhido o parmetro $\Delta(t)$ a ser uma constante positiva, $\Delta(t) = |\Delta|$, e a frequncia de transio ϵ possui uma dependncia linear no tempo, i.e. $\epsilon(t) = |\alpha|t$, pode-se usar a teoria de Landau-Zener para quantificar a probabilidade de transio desde o estado fundamental ao excitado. (52, 53) O valor dessa probabilidade pode ser calculada exatamente na situao idealizada, i.e. $\epsilon(t \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \pm\infty$, dada pela relao,

$$P_{g \rightarrow e} = \exp \left[-\frac{\pi |\Delta|^2}{2\hbar \frac{d\epsilon}{dt}} \right] \quad (2.1.12)$$

onde $|\Delta|$ representaria o gap mnimo como pode se ver na Fig. 2.1.3. A relao entre o gap e a taxa de variao determina a adiabaticidade da dinmica desse sistema, pois se deseja-se manter o sistema no estado fundamental precisa-se controlar adequadamente $\epsilon(t)$ a partir do comportamento do gap.

A partir de (2.1.11) percebe-se que quando a parte transversal Δ nula existe um ponto de energia zero em $\epsilon(t) = 0$ (ponto de “degenerescncia”), no entanto, quando Δ ligado abre um gap formando um cruzamento evitado (*avoided crossing* ou *anticrossing*) o qual uma assinatura da superposio de autoestados de σ_z . (54) Esse tipo de cruzamentos evitados indicam a existncia de emaranhamento quntico para sistemas de vrios qubits⁹. (56, 57)

Usando a perspectiva de uma quase-partcula num potencial de poo duplo como pode ser observado na Fig. 2.1.4, quando a varivel $\epsilon < 0$ o potencial assimtrico e o estado fundamental do qubit est localizado no mnimo global (painel a). medida que ϵ vai aumentando adiabaticamente o potencial adquire simetria at que em $\epsilon = 0$ totalmente

⁹ Um estado quntico ρ definido no espao de Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ chamado a ser separvel se existem matrizes densidade $\rho_A^{(j)}$, $\rho_B^{(j)}$ e $p_j \geq 0$ com $\sum_j p_j = 1$ tal que $\rho = \sum_j p_j \rho_A^{(j)} \otimes \rho_B^{(j)}$. Quando no possvel escrever o estado ρ dessa forma dizemos que um estado emaranhado. Para mais detalhes de emaranhamento quntico ver por exemplo (55).

Figura 2.1.3 – Dinâmica de níveis de um qubit, cujo Hamiltoniano é $H_{1Q}(t) = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\epsilon(t)}{2}\sigma_z$, onde $\Delta > 0$ e $\epsilon(t) \equiv |\alpha|t$. Se o qubit inicia sua dinâmica em $t = -\infty$, o estado fundamental é dado pelo autovetor de σ_z , $|\downarrow\rangle$. Durante a variação temporal do parâmetro ϵ , ele vai se tornando da ordem de Δ até o ponto de alcançar um “cruzamento evitado” e atingir o gap mínimo quando ϵ é nulo. Quando $\epsilon = 0$, o estado fundamental instantâneo é o autovetor de σ_x , $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$. Se continuamos variando ϵ até $t = \infty$, o sistema vai se manter no estado fundamental instantâneo $|\uparrow\rangle$ com uma probabilidade que é dada pela fórmula de Landau-Zener (2.1.12). A linhas tracejadas indicam os autovalores de H_{1Q} quando $\Delta = 0$, i.e. $E_{1,0}(t) = \pm \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon^2(t)} = \pm \frac{1}{2}|\alpha t|$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

simétrico, tal que nessa configuração, os estados fundamental e excitado são superposições simétricas e antissimétricas respectivamente dos estados do lado direito e esquerdo do poço (painel b). (58) Quando continua-se variando ϵ e vira uma quantidade positiva, o poço fica de novo assimétrico e se o sistema seguiu uma dinâmica adiabática a quase-partícula vai continuar com alta probabilidade no estado fundamental o qual está localizado no mínimo global (painel c). Para conseguir alcançar o poço de menor energia, a quase-partícula deve tunelar a barreira de potencial, cuja probabilidade de manter o sistema no estado fundamental depende das dimensões de dita barreira. (41)

Acredita-se que o tunelamento quântico outorga uma grande vantagem nos protocolos de otimização quânticos sobre os clássicos quando as barreiras que separam diferentes configurações são predominantemente altas e finas, permitindo que a eficiência de cômputo seja maior. (1, 34–36)

Figura 2.1.4 – Dinâmica de um sistema de dois níveis a partir de uma perspectiva do potencial de poço duplo em função do parâmetro de controle $\epsilon(t)$. Se uma quase-partícula inicia sua dinâmica no poço mais profundo de (a), i.e., no estado fundamental, e se ϵ é modificado adiabaticamente é possível manter-lhe sempre no estado fundamental tal que no final da dinâmica (c) ele terá tunelado a barreira e agora se encontrará no fundo do outro poço.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Capítulo 3

QUBITS FÍSICOS PARA AQ E CQA

Para desenvolver experimentalmente os protocolos de AQ e CQA têm sido propostas várias implementações para obter os qubits físicos que permitam resolver certos problemas de interesse. A partir de átomos neutros aprisionados foi possível preparar quatro qubits¹ para estudar o desempenho de um problema para minimizar um polinômio quadrático de variáveis binárias conhecido como o problema QUBO (*Quadratic unconstrained binary optimization*) cuja solução estava codificada no estado fundamental de um Hamiltoniano do tipo (2.1.2). (16) Por outro lado, explorando o fenômeno de ressonância magnética nuclear foi factível realizar vários experimentos, entre eles: i) com 3 três qubits foi simulado um algoritmo de otimização quântica adiabática para resolver o problema de corte-máximo (MAXCUT) considerado como NP-completo (13); ii) foi simulado o algoritmo de Shor para fatorar o número 21 (14) e 143 (15) usando respectivamente três e quatro qubits.

Sob outra perspectiva, em 2004 foi apresentada teoricamente uma arquitetura baseada a partir de circuitos supercondutores, a qual serviria para simular o Hamiltoniano associado com problemas do tipo NP. (59) Posteriormente a essa proposta teórica apareceram implementações físicas com poucos qubits (60–62) e logo depois conseguiu-se resolver o problema de corte-máximo usando três qubits acoplados. (17) Com o passar dos anos, foi possível aperfeiçoar esses pequenos sistemas usando AQ (40), conseguindo obter rapidamente sistemas controlados de 8 qubits supercondutores. (18, 63) Subsequentemente, foi factível aumentar o número de qubits no processador quântico supercondutor alcançando há uns anos atrás mais de 100 bits quânticos. (64) Atualmente, a empresa canadense D-Wave conseguiu aumentar o tamanho de seu processador quântico atingindo mais que 2000 qubits supercondutores, chamando-lhe “D-Wave 2000Q”. (65) Acredita-se que este dispositivo dará um enorme apoio para continuar com o estudo e desenvolvimentos de técnicas para analisar desde o enovelamento de uma proteína (66) até no caso do aprendizado de máquina para resolver problemas

¹ Com tecnologias atuais podem chegar a criar e manipular até 20 qubits com essa técnica. (16)

complexos. (67, 68)

Como vemos, é plausível fabricar qubits baseado em diversas implementações, não obstante surgem dificuldades de controle quando se requer trabalhar com um número muito grande de qubits. No entanto, os circuitos supercondutores por conta principalmente das técnicas de microfabricação que permitem grande escalabilidade, têm se tornado um dos candidatos mais promissores para a computação quântica adiabática e por causa do potencial demonstrado para resolver diversos problemas (66, 69–72), nós estaremos enfocados nesse tipo de implementação física e conseqüentemente vamos descrever as características principais em alguns tipos de qubits baseados em circuitos supercondutores.

3.1 Qubits Supercondutores

Os qubits fabricados a partir de dispositivos supercondutores são elementos construídos por circuitos elétricos que contêm junções Josephson que podem se controlar principalmente por fluxos magnéticos externos. Introduzir fluxos magnéticos apropriados vai proporcionar criar uma dinâmica determinada por um potencial que permitirá simplificar a análise a simplesmente nos focar nos dois primeiros estados mais baixos de energia, de tal maneira que é possível descrever essa dinâmica por um qubit. (73)

Esses circuitos supercondutores exploram dois fenômenos quânticos fundamentais conhecidos como:

- Quantização do fluxo. (74)
- Efeito Josephson. (75, 76)

O primeiro fenômeno surge a partir do análise de um anel supercondutor em cuja situação se é aplicado um fluxo magnético Φ , como é observado na Fig. 3.1.1(a), no anel se manifesta uma supercorrente I , cuja densidade de corrente pode-se escrever como (considerando $T = 0$) (77),

$$\mathbf{J}_s = \frac{e_s}{2m_s} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e_s \mathbf{A} \right) \psi - \psi \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e_s \mathbf{A} \right)^* \psi^* \right] \quad (3.1.1)$$

$$= \frac{e_s \hbar}{2m_s i} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] - \frac{e_s^2 \mathbf{A}}{m_s} |\psi|^2, \quad (3.1.2)$$

Figura 3.1.1 – (a) Anel supercondutor no qual é aplicado um fluxo magnético sendo o fluxo total no anel quantizado como $\Phi = m\Phi_0$. (b) Esquema de uma junção Josephson, formada por dois supercondutores separados por um material não supercondutor (tradicionalmente um isolante) pelo qual tunelam pares de Cooper.

Fonte: YOU; NORI. (78)

onde e_s e m_s são a carga e a massa da partícula supercondutora, respectivamente. $\mathbf{A}$ representa o potencial vetor e ψ é a função de onda (complexa) do condensado de pares de Cooper que pode ser escrita como,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)| e^{i\theta(\mathbf{r}, t)} = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}, \quad (3.1.3)$$

tal que $n(\mathbf{r}, t)$ é a densidade de portadores e $\theta(\mathbf{r}, t)$ é a fase da função de onda. Logo, considerando que $n(\mathbf{r}, t)$ tem um valor constante definido como n_s , e substituindo (3.1.3) em (3.1.1), obtemos que,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_s &= \frac{e_s \hbar}{2m_s i} [n_s i \nabla \theta(\mathbf{r}, t) - (-i) n_s \nabla \theta(\mathbf{r}, t)] - \frac{e_s^2 \mathbf{A}(\mathbf{r})}{m_s} n_s \\ &= \frac{e_s \hbar}{m_s} n_s \nabla \theta(\mathbf{r}, t) - \frac{e_s^2 \mathbf{A}(\mathbf{r})}{m_s} n_s, \end{aligned}$$

reescrevendo, temos que

$$\hbar \nabla \theta(\mathbf{r}, t) = \frac{m_s}{e_s} n_s \mathbf{J}_s + e_s \mathbf{A}(\mathbf{r}).$$

Agora, se integramos essa expressão ao longo de uma trajetória fechada muito profunda do supercondutor, tal que é assumido que o anel seja o suficientemente largo para obter que numa região profunda dele não existam correntes, pelo fato que a corrente flui através da superfície e decai exponencialmente quando se aproxima ao interior, dessa maneira conseguimos que $\mathbf{J}_s$

seja nulo e portanto,

$$\begin{aligned} \hbar \oint_C \nabla \theta \cdot d\mathbf{r} &= e_s \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \\ \hbar \lim_{\mathbf{r}_b \rightarrow \mathbf{r}_a} (\theta(\mathbf{r}_b, t) - \theta(\mathbf{r}_a, t)) &= e_s \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} = e_s \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \\ \hbar 2\pi m &= e_s \Phi_B, \end{aligned}$$

onde $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, Φ_B é o fluxo magnético e temos usado o fato que θ é uma função *single-valued* ao longo da trajetória fechada (79) tal que $m \in \mathbb{Z}$, e vemos finalmente que o fluxo magnético é quantizado,

$$\Phi_B = 2\pi m \frac{\hbar}{e_s} \equiv m\Phi_0,$$

tal que $\Phi_0 \equiv h/e_s \approx 2.07 \times 10^{-15} \text{Wb}$ é o quantum de fluxo e $e_s = 2e$.

Por outro lado, o efeito Josephson é um fenômeno devido ao tunelamento de partículas carregadas (pares de Cooper) entre dois elementos supercondutores que encontram-se separados por um fino material não supercondutor² (ver Fig. 3.1.1 (b)), gerando-se dessa maneira uma corrente elétrica (corrente Josephson). A dinâmica acoplada dos dois condensados pode-se escrever da seguinte maneira (77, 79),

$$i\hbar \frac{\partial \psi_A}{\partial t} = E_A \psi_A + \Delta \psi_B, \quad (3.1.4)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = E_B \psi_B + \Delta \psi_A, \quad (3.1.5)$$

onde a constante Δ é uma característica da junção, associada à sobreposição das funções de onda de cada condensado. Considerando a função de onda que descreve cada supercondutor (A, B) tal como aparece na equação (3.1.3) e substituindo em (3.1.4) e (3.1.5) encontramos

² O efeito Josephson também aparece em outros tipos de estruturas, tal como supercondutores acoplados por um contato fraco. (80)

o seguinte conjunto de equações,

$$\dot{n}_A = \frac{2\Delta}{\hbar} \sqrt{n_A n_B} \sin(\theta_B - \theta_A) \quad (3.1.6)$$

$$\dot{n}_B = \frac{2\Delta}{\hbar} \sqrt{n_A n_B} \sin(\theta_A - \theta_B) = -\dot{n}_A. \quad (3.1.7)$$

$$-\dot{\theta}_A = \frac{\Delta}{\hbar} \sqrt{\frac{n_B}{n_A}} \cos(\theta_A - \theta_B) + \frac{E_A}{\hbar}, \quad (3.1.8)$$

$$-\dot{\theta}_B = \frac{\Delta}{\hbar} \sqrt{\frac{n_A}{n_B}} \cos(\theta_A - \theta_B) + \frac{E_B}{\hbar}. \quad (3.1.9)$$

Se é assumido que $n_A \approx n_B$ tal que $\sqrt{n_A n_B} \equiv n_s$ e definindo $\phi \equiv \theta_A - \theta_B$, vemos que (3.1.6) pode-se escrever como,

$$\begin{aligned} I &= \frac{2\Delta}{\hbar} n_s \sin \phi \\ &\equiv I_C \sin \phi, \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

onde tem-se usado o fato que $\dot{n}_A$ é a corrente I através da junção e definido a *corrente crítica* I_C . Por outro lado, subtraindo as equações (3.1.8) e (3.1.9), vemos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\theta_A - \theta_B) &= -\frac{E_A}{\hbar} + \frac{E_B}{\hbar} \\ \frac{d\phi}{dt} &= \frac{E_B - E_A}{\hbar} = \frac{e_s V}{\hbar} \\ &= \frac{2eV}{\hbar}. \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

onde temos usado o fato que a energia que ganha uma partícula de carga e_s quando se desloca através de uma diferença de potencial V é $e_s V$ e $e_s = 2e$. Dessa forma, encontramos as equações (3.1.10) e (3.1.11) que governam a dinâmica do efeito Josephson. (75, 76)

Nessa ordem de ideias, se derivarmos no tempo a (3.1.10) e usando a relação (3.1.11), consegue-se ver que a variação no tempo da corrente depende proporcionalmente com a voltagem, i.e.: $\dot{I} = I_C \dot{\phi} \cos \phi = I_C 2\pi \cos \phi V / \Phi_0$. Ademais, pelo fato que a voltagem induzida por qualquer mudança no fluxo magnético através do circuito é $V = d\Phi/dt = L\dot{I}$ pois $L = d\Phi/dI$, podemos definir uma indutância Josephson,

$$|L_J| \equiv \frac{\Phi_0}{I_C 2\pi \cos \phi}, \quad (3.1.12)$$

onde vemos que a junção Josephson se comporta como um indutor não linear. (81)

Agora, como os pares de Cooper que fluem através do circuito possuem uma energia

cinética e potencial, podemos expressar sua energia potencial como (82),

$$\begin{aligned}
 U &= \int dt IV \\
 &= \int dt I_C \sin \phi \frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{d\phi}{dt} \\
 &= I_C \frac{\Phi_0}{2\pi} \int d\phi \sin \phi \\
 &= -I_C \frac{\Phi_0}{2\pi} \cos \phi + \text{cte.} \\
 &\equiv -E_J \cos \phi + \text{cte.},
 \end{aligned} \tag{3.1.13}$$

onde tem-se definido a energia Josephson $E_J \equiv I_C \frac{\Phi_0}{2\pi}$. Por outro lado, a energia cinética dos pares de Cooper está associada à carga acumulada Q na junção, dada por $Q^2/2C$ onde C é a capacitância intrínseca da junção. Em síntese, a energia total do circuito é,

$$H = \frac{Q^2}{2C} + U(\phi),$$

onde pode-se redefinir a carga Q em termos do número de pares de Cooper que têm tunelado através da junção (n) e de um parâmetro que depende da configuração do sistema e sua interação eletrostática com o entorno (n_g) tal que n é um número inteiro e n_g pode tomar valores reais arbitrários. Dessa forma a energia da junção pode-se escrever como,

$$H = 4E_C (n - n_g)^2 - E_J \cos \phi, \tag{3.1.14}$$

tal que nesse caso $E_C \equiv e^2/2C$. Logo, escrevendo a Lagrangiana do sistema,

$$\mathcal{L} = \frac{Q^2}{2C} + E_J \cos \phi,$$

podemos ver que a carga (Q) e a fase (ϕ) são variáveis canonicamente conjugadas, e a partir da quantização canônica é possível escrever o Hamiltoniano quântico identificando $Q \rightarrow \hat{Q}$ e $\phi \rightarrow \hat{\phi}$ de tal forma que obtemos,

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{\hat{Q}^2}{2C} + E_J \cos \hat{\phi}. \\
 &= 4E_C (\hat{n} - n_g)^2 + E_J \cos \hat{\phi}.
 \end{aligned} \tag{3.1.15}$$

onde, $[\hat{n}, \hat{\phi}] = -i$ tal que $\hat{n} \equiv -i\partial_{\hat{\phi}}$.

Por outro lado, a relação que existe entre as duas energias, E_J e E_C define os diferentes

tipos de qubits supercondutores³. Por exemplo os mais básicos são os *qubits de carga* cuja relação das energias é $E_C \gg E_J$ e nos *qubits de fluxo* e *fase*, é satisfeita a relação $E_C \ll E_J$. Existem diversos tipos de qubits supercondutores baseados nos anteriores (83–87), mas nesse trabalho somente será de nosso interesse discutir os casos dos qubits de carga e fluxo.

3.1.1 Qubit de Carga

O mais simples qubit de carga é formado por uma pequena ilha supercondutora, conhecida como *Cooper-pair box* (CPB), com n pares de Cooper em excesso (relativo ao estado de carga neutro), está conectada por uma junção Josephson, com capacitância C_J e energia de acoplamento E_J , a um eletrodo supercondutor. O sistema é controlado por uma fonte de voltagem V_g que se acopla através de um capacitor C_g como se observa na Fig. 3.1.2 (a). Para este caso, a energia eletrostática de um *single-electron* é $E_C = \frac{q^2}{2C} = \frac{e^2}{2} \left(\frac{1}{C_g} + \frac{1}{C_J} \right)$, e é configurada a ser muito maior que E_J ⁴.

Sob estas condições, os pares de Cooper que tunelam a junção são descritos pelo Hamiltoniano (3.1.15),

$$\hat{H} \equiv 4E_C (\hat{n} - n_g)^2 - E_J \cos \hat{\phi}, \quad (3.1.16)$$

tal que nesse caso define-se o parâmetro de controle como $n_g \equiv C_g V_g / 2e$. No regime de operação dos qubits de carga ($E_C \gg E_J$) se faz conveniente usar a base formada pelos estados de carga, parametrizados pelo número de pares de Cooper em excesso na ilha ($\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$). Dessa maneira, o Hamiltoniano (3.1.16) nessa representação seria,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= 4E_C \sum_{n=0}^{\infty} (n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - E_J \sum_{n,m=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| \cos \hat{\phi} |m\rangle\langle m| \\ &= 4E_C \sum_{n=0}^{\infty} (n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - E_J \sum_{n,m=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| \int d\phi |\phi\rangle\langle \phi| \cos \phi |m\rangle\langle m| \\ &= 4E_C \sum_{n=0}^{\infty} (n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - E_J \sum_{n,m=0}^{\infty} \int d\phi |n\rangle\langle n| |\phi\rangle\langle \phi| |m\rangle\langle m| \cos \phi, \end{aligned}$$

como $\hat{\phi}$ e $\hat{n}$ são variáveis canônicas, temos que $\langle n|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi}$, portanto,

$$\hat{H} = 4E_C \sum_{n=0}^{\infty} (n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - E_J \sum_{n,m=0}^{\infty} |n\rangle\langle m| \frac{1}{2\pi} \int d\phi e^{in\phi} e^{-im\phi} \left(\frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \right)$$

³ Deve-se assumir que o gap de energia supercondutora é a maior escala de energia do problema, dessa forma podemos desprezar o processo de quebra de pares.

⁴ Valores típicos são $E_C \geq 1\text{K}$ e $E_J \sim 100\text{mK}$ (73).

Figura 3.1.2 – Modelos de qubit de carga. (a) O mais simples constituído principalmente por uma CPB cuja única variável controlável é a tensão V_g . (b) Para ter controle sobre a energia Josephson E_J^0 , é realizado um circuito mais complexo, substituindo o CPB por um anel interrompido por duas junções Josephson no qual é aplicado um fluxo externo Φ_x no interior dele.

Fonte: MAKHLIN et al. (73)

$$\begin{aligned}
 &= 4E_C \sum_{n=0}^{\infty} (n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - E_J \sum_{n,m=0}^{\infty} |n\rangle\langle m| \frac{1}{2} [\delta(n - m + 1) + \delta(n - m - 1)] \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ 4E_C (n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - \frac{E_J}{2} (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) \right\}.
 \end{aligned}$$

Agora, para ter uma ideia mais clara do comportamento do espectro energético, permitamos inicialmente considerar o caso quando $E_J = 0$, e plotando o espectro podemos ver que cada autoestado do Hamiltoniano está determinado pelo setor de cada estado de carga como se observa na Fig. 3.1.3. Por exemplo, o estado fundamental estaria determinado pelo estado de carga $|n = 0\rangle$ no intervalo $0 < n_g < 0.5$, pelo estado de carga $|n = 1\rangle$ entre o intervalo $0.5 < n_g < 1.5$, e assim por diante.

Figura 3.1.3 – Espectro energético do Hamiltoniano quando $E_J = 0$ em função da variável n_g . Nesse caso, cada parábola indica um estado de carga diferente, $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$ e os autoestados do Hamiltoniano seriam determinados pelas devidas combinações de estes estados de carga.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No entanto, quando é acrescentado o termo de acoplamento E_J , os pontos de degenerescência associados a estados que diferem de um par de Cooper se repelem pois o Hamiltoniano Josephson acopla o estado $|n\rangle$ com $|n+1\rangle$. Quando a voltagem V_g é tal que $n_g \approx 1/2$ (ou $(2n+1)/2$), o sistema se encontra numa região de gap mínimo entre os estados fundamental e excitado. Nessa situação, a dinâmica do sistema pode se restringir a analisar somente os estados de carga $|n=0\rangle$ e $|n=1\rangle$, se são consideradas energias que mantenham o sistema somente entre esses dois estados, impedindo que seja possível o sistema se excitar a estados superiores. Portanto, na vizinhança de $n_g = 1/2$ o Hamiltoniano pode se escrever assim,

$$\begin{aligned}\hat{H} &\approx 4E_C \left((-n_g)^2 |0\rangle\langle 0| + (1-n_g)^2 |1\rangle\langle 1| \right) - \frac{E_J}{2} (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|) \\ &= 4E_C \left(n_g^2 |0\rangle\langle 0| + (1-2n_g+n_g^2) |1\rangle\langle 1| \right) - \frac{E_J}{2} (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|) \\ &= 4E_C n_g^2 (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) + 4E_C (1-2n_g) |1\rangle\langle 1| - \frac{E_J}{2} (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)\end{aligned}$$

tal que rescrevendo $\hat{H}$ em termos das matrizes de Pauli temos que,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= 4E_C n_g^2 \mathbb{I} + 4E_C (1-2n_g) \frac{I - \sigma_z}{2} - \frac{E_J}{2} \sigma_x \\ &= \mu \mathbb{I} - 4E_C (1-2n_g) \frac{\sigma_z}{2} - \frac{E_J}{2} \sigma_x\end{aligned}$$

onde usamos $|1\rangle\langle 1| = \frac{I - \sigma_z}{2}$ e definido $\mu \equiv 2E_C [2n_g^2 + 1 - 2n_g]$. Portanto, perto da região do gap mínimo o sistema é descrito pelo Hamiltoniano de dois níveis (omitindo o termo $\mu \mathbb{I}$),

$$\hat{H}_{TLS} = -\frac{\epsilon}{2} \sigma_z - \frac{\Delta}{2} \sigma_x, \quad (3.1.17)$$

onde $\epsilon \equiv 4E_C(1-2n_g)$ e $\Delta \equiv E_J$. Perceba-se que neste caso ϵ é o único parâmetro controlado externamente, então para conseguir manipular Δ deve-se construir um circuito mais complexo como se vê na Fig 3.1.2 (b). Nesse novo circuito, se substitui o CPB por duas junções Josephson numa configuração de anel e se aplica um fluxo magnético no interior dele que permitirá ter controle sobre a amplitude de tunelamento Δ . (73) Quando se acrescenta esse fluxo, a condição de quantização no interior do anel se vê modificada por causa das duas junções obtendo uma nova condição: $\Phi_x + \frac{\Phi_0}{2\pi} \phi_1 - \frac{\Phi_0}{2\pi} \phi_2 = k\Phi_0$ ($k \in \mathbb{Z}$), tal que ϕ_1 e ϕ_2 representam as diferenças da fase supercondutora. Se a autoindutância do anel é pequena

(88), a energia potencial modifica-se como,

$$\begin{aligned}
 E_J^1 \cos \phi_1 + E_J^2 \cos \phi_2 &= E_J^0 (\cos \phi_1 + \cos \phi_2) \\
 &= 2E_J^0 \cos \left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \right) \\
 &= 2E_J^0 \cos(\phi) \cos \left(\frac{\pi \Phi_x}{\Phi_0} \right),
 \end{aligned}$$

onde $\phi_{1,2} \equiv \phi \mp \frac{\pi \Phi_x}{\Phi_0}$ e temos assumido junções idênticas ($E_J^1 = E_J^2 \equiv E_J^0$), fazendo que o termo de energia potencial de (3.1.16) seja alterado. Nessa ordem de ideias, se são escolhidos os parâmetros do sistema de tal forma que somente são relevantes dois estados de carga, retornamos a representar ao circuito como um sistema de dois níveis, portanto encontramos que,

$$\Delta(\Phi_x) = 2E_J^0 \cos \left(\frac{\pi \Phi_x}{\Phi_0} \right), \quad (3.1.18)$$

dessa forma a amplitude de tunelamento pode ser controlada pelo fluxo Φ_x , e $\epsilon = 4\tilde{E}_C(1-2n_g)$ onde $\tilde{E}_C \equiv \frac{e^2}{2} \left(\frac{1}{C_g} + \frac{1}{2C_J^0} \right)$ e usado o fato que são junções idênticas tal que $C_J^1 = C_J^2 \equiv C_J^0$.

3.1.2 Qubit de Fluxo

Para este tipo de qubit, as flutuações de carga são muito grandes e observa-se que o fluxo magnético seja um número quântico apropriado, de forma que os autoestados do Hamiltoniano neste circuito sejam basicamente os associados ao fluxo. Nesse caso, as energias Josephson e de carga tipicamente satisfazem a proporção $E_J/E_C \sim 50$. (81) Na Fig. 3.1.4 (a) mostra-se o dispositivo mais simples com o qual é possível construir um qubit de fluxo, cujo circuito consiste de um anel supercondutor com uma única junção Josephson. Esse circuito supercondutor é conhecido na literatura como um *rf-SQUID* (por suas siglas em inglês: radio frequency superconducting quantum interference device), cujo Hamiltoniano consegue-se escrever como (63, 73),

$$\hat{H}_{rf-S} = \frac{\hat{Q}^2}{2C} + \frac{(\hat{\Phi} - \Phi_x)^2}{2L} - E_J \cos \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \hat{\Phi} \right), \quad (3.1.19)$$

onde Q e C são a carga e capacitância da junção Josephson, respectivamente. Φ_x é um fluxo magnético externo de controle, L é a indutância do anel, Φ representa o fluxo magnético através do anel supercondutor e com sua variável conjugada Q , satisfazem a relação de anticomutação $[\hat{\Phi}, \hat{Q}] = i\hbar$, pois $\hat{\Phi} \equiv \Phi_0 \hat{\phi}/2\pi$.

Figura 3.1.4 – (a) Um anel interrompido por uma junção Josephson com um fluxo magnético Φ_x através dele consegue descrever o mais simples qubit de fluxo. (b) Para obter um controle maior sobre os qubit é substituída a junção por um novo anel interrompido por duas junções.

Fonte: MAKHLIN, et al. (73)

Permitamos analisar a energia potencial desse SQUID $U(\Phi) \equiv \frac{(\Phi - \Phi_x)^2}{2L} - E_J \cos\left(\frac{2\pi}{\Phi_0}\Phi\right)$ considerando $\beta_L \equiv \frac{2\pi I_0 L}{\Phi_0} > 1$, e variando o fluxo externo Φ_x desde 0 a Φ_0 . Fazendo isso, o potencial se modifica como se observa na Fig. 3.1.5, passando inicialmente por uma configuração estável ($\Phi_x = 0$), logo por uma biestável ($\Phi_x = \Phi_0/2$) até chegar numa metaestável ($\Phi_x = \Phi_0$). Na região da vizinhança de $\Phi_x = \Phi_0/2$ (conhecido na literatura como ponto de degenerescência), os níveis de energia fundamental e excitado experimentam um cruzamento evitado e se comportam de maneira equivalente como foi discutido na seção anterior e que pode ser visto na Fig. 2.1.3. Se a dinâmica for tal que apenas os dois estados mais baixos de energia são relevantes, de modo que não existam vazamentos a estados superiores, pode-se descrever a dinâmica do sistema a partir de um Hamiltoniano efetivo de dois níveis, da forma da equação (2.1.11), i.e.,

$$H_{1Q} = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\epsilon(t)}{2}\sigma_z, \quad (3.1.20)$$

onde $\Delta = \langle e|H_{rf-S}|\Phi_x = \Phi_0/2\rangle\langle e| - \langle g|H_{rf-S}|\Phi_x = \Phi_0/2\rangle\langle g|$ é a energia de tunelamento e $\epsilon(t) = 2|I_p|(\Phi_x(t) - \frac{\Phi_0}{2})$ com $|I_p| \equiv \frac{|\langle \uparrow|\Phi|\uparrow\rangle|}{L}$ sendo a magnitude da corrente persistente através do SQUID. (89) Na definição desses parâmetros foi escolhida, por um lado, a base de autoenergias $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ os quais denotam o estado fundamental e excitado, e de forma alternativa, foi usada uma base a partir da superposição simétrica e antissimétrica das autoenergias $|g\rangle$ e $|e\rangle$ definidas como $|\uparrow\rangle \equiv (|g\rangle + |e\rangle)/\sqrt{2}$ e $|\downarrow\rangle \equiv (|g\rangle - |e\rangle)/\sqrt{2}$, conhecida como a base de fluxo, e é observado claramente na Fig. 3.1.6.

Com o rf-SQUID é somente possível controlar o parâmetro ϵ , então com o propósito de ter controle da energia de tunelamento Δ , pode-se substituir a junção Josephson do circuito da Fig. 3.1.4 (a) por um anel pequeno que contenha duas junções como é observado na Fig. 3.1.4 (b), denominado tradicionalmente na literatura como *compound Josephson junction*

Figura 3.1.5 – Modificação do potencial $U(\Phi) \equiv \frac{(\Phi - \Phi_x)^2}{2L} - E_J \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\right)$ quando $\beta_L \equiv \frac{2\pi I_0 L}{\Phi_0} > 1$. Para diferentes valores do fluxo externo consegue-se ver as diferentes configurações pelas quais o sistema passa, indo de uma configuração estável quando $\Phi_x = 0$ (a), depois por uma biestável quando o fluxo externo está no ponto de degenerescência $\Phi_x = \Phi_0/2$ (b), e finalmente chega numa metaestável $\Phi_x = \Phi_0$ (c).

Fonte: Elaborada pelo autor.

(CJJ) rf-SQUID⁵. (89) A presença do pequeno anel permite realizar um controle extra da energia potencial do sistema por causa do fluxo externo $\tilde{\Phi}_x$ que é aplicado através dele. Sob as condições adequadas, esse novo dispositivo será descrito por um Hamiltoniano da forma 3.1.19, mas com uma energia Josephson dependendo do fluxo externo que atinge o pequeno anel (ver informação suplementar de (18)). Dessa forma, os dois parâmetros do Hamiltoniano (3.1.20), Δ e ϵ conseguem ser controlados externamente.

A fim de melhorar o poder computacional é necessário possuir muitos recursos (qubits), porém, isto traz consigo o aumento da complexidade da sua manipulação experimentalmente e descrição matemática. (73, 90) Dessa forma, quando se pretende acoplar dois qubits é necessário introduzir um elemento “passivo”, i.e., um dispositivo que não modifique a dimensão do sistema efetivo. (91) Para garantir que o sistema de dois qubits e um acoplador se mantenha de dimensão 4, esse elemento passivo deve ter um gap de energia entre o estado fundamental e o primeiro excitado muito grande em comparação ao gap característico de cada qubit, isso quer dizer, que o acoplador sempre estará no estado fundamental durante a dinâmica total, permitindo que a dimensão do espaço de Hilbert se veja inalterada. No entanto, os fluxos que se aplicam ao acoplador são os que vão permitir ter controle sobre o acoplamento entre os qubits.

Nessa ordem de ideias, o Hamiltoniano para um conjunto de CJJ rf-SQUID's acoplados, sob as condições adequadas pode ser escrito como uma rede de qubits acoplados (92),

$$\hat{H}_{N-q} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[2|I_p^i| \left(\Phi_x^{(i)} - \Phi_0^{(i)} \right) \sigma_z^{(i)} + \Delta \sigma_x^{(i)} \right] + \sum_{i,j=1}^N M^{(ij)} |I_p^i| |I_p^j| \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)}, \quad (3.1.21)$$

⁵ Uma estrutura mais complexa também usada é o *compound-compound Josephson junction* (CCJJ) rf-SQUID, no qual são substituídas as duas junções do CJJ por anéis que contêm duas novas junções. (89)

Figura 3.1.6 – Desenho dos dois autoestados mais baixos de energia de um rf-SQUID no ponto de degenerescências $\epsilon = 0$. Perceba-se que o segundo estado excitado (linha azul clara tracejada) encontra-se muito afastado de $|g\rangle$ e $|e\rangle$, portanto se são aplicadas frequências $\sim \Delta$ pode-se garantir com muita certeza que o sistema se manterá entre $|g\rangle$ e $|e\rangle$.

Fonte: HARRIS *et al.* (89)

onde $|I_p^i|$ é a corrente persistente fluindo através do i -ésimo anel cujo controle é feito pelo fluxo externo $\Phi_x^{(i)}$, $\Phi_0^{(i)}$ é o ponto de degenerescência que pode ser configurado igual a $\frac{\Phi_0}{2}$ como foi feito acima, Δ pode ser configurado igual para todos os qubits (i.e., C , L e E_J possuem os mesmos valores para todos os SQUID's) e é controlado pelo fluxo $\tilde{\Phi}_x^{(i)}$, $M^{(ij)}$ indica a indutância mutua entre o i -ésimo e j -ésimo qubit e é controlado pelos fluxos aplicados no SQUID acoplador. (92)

Capítulo 4

DINÂMICA ADIABÁTICA EM CADEIAS FABRICADAS

Previamente foi argumentado que uma das dificuldades que surgem quando se pretende realizar a implementação física de um processador quântico adiabático é o controle, cuja dificuldade aumenta à medida que o número de qubits físicos usados é maior. Além disso, outros inconvenientes também aparecem, seja por causa da imperfeição na construção dos dispositivos ou por operação errônea no acoplamento entre os qubits físicos, ruído por causa da interação com o ambiente, entre outros fatores.

Dessa forma, é natural que nos dispositivos fabricados os parâmetros que determinam o Hamiltoniano do sistema (3.1.21),

$$H(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[2|I_p^i| \left(\Phi_x^{(i)} - \Phi_0^{(i)} \right) \sigma_z^{(i)} + \Delta \sigma_x^{(i)} \right] + \sum_{i,j=1}^N M^{(ij)} |I_p^i| |I_p^j| \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)},$$

apresentem uma flutuação ao redor de um valor ideal devido a sua fabricação e manipulação. (93) No caso de qubits supercondutores, desvios habituais para C , L e I_C são reportados a ser perto do 5% (94, 95), os quais podem levar em mudanças perceptíveis nas características do qubit, reduzindo assim a fidelidade das operações realizadas. Por causa disso, uma estratégia de sincronização foi desenvolvida para lidar com pequenas variações ($\sim 1\%$) nos valores de indutância e corrente crítica do dispositivo. (94) De fato, Harris e colaboradores demonstraram teórica e experimentalmente que ajustando adequadamente o fluxo aplicado a cada qubit era possível corrigir os desvios causados pelas variações dos parâmetros físicos.

Apesar do sucesso do método ainda é possível verificar certa discrepância entre a corrente persistente e a amplitude de tunelamento corrigidas e seus valores. Por outro lado, recentemente foi analisado como flutuações nos acoplamentos dos qubits (J_{ij}) e dos campos

longitudinais (h_i) afetariam a configuração do estado fundamental do Hamiltoniano problema $H_P = \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)} + \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)}$ para alguns casos de interesse, onde foi mostrado que essas flutuações podem conduzir a perturbações não desprezíveis do problema original. (95) Em outras palavras, nesse último trabalho foi analisado somente os erros gerados pelas flutuações no final do protocolo adiabático, i.e., erros estáticos, mas sem explorar os efeitos produzidos durante a dinâmica.

Dessa forma, com o intuito de acrescentar essa discussão e entender a influência das flutuações nos parâmetros de interesse sobre a fidelidade da computação nós tomamos a perspectiva de analisar a dinâmica total considerando a evolução temporal do sistema, e não simplesmente nos concentrar nas perturbações do estado final do protocolo, tal que considerando esses efeitos dinâmicos vai ser requerido um maior esforço para garantir a adiabaticidade no sistema. Os achados desta parte da tese estão apresentados no trabalho (preprint). (96)

4.1 Desordem nos parâmetros característicos

Desse modo, baseados no Hamiltoniano (3.1.21), nós simulamos a dinâmica unitária determinada por (2.1.10) i.e.,

$$\begin{aligned} H(t) &= A(t)H_0 + B(t)H_P, \\ H_0 &= -\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} \sigma_x^{(i)}, \\ H_P &= \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)} + \sum_{i=1}^{N-1} J_{i,i+1} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)}, \end{aligned}$$

para tamanhos de cadeias de $N = 8$ e considerando λ_i e h_i como variáveis Gaussianas estáticas com desvio padrão σ , cujos valores médios $(\bar{\lambda}_i, \bar{h}_i)$ são entendidos como as quantidades ideais vinculadas ao problema de interesse.

Além disso, com o objetivo de analisar diferentes problemas, nós escolhemos valores aleatórios para os acoplamentos $J_{i,i+1}$ a partir do intervalo $[-J, J]$, pois percebe-se que cada vez que $J_{i,i+1}$ é alterado temos um problema diferente. Além disso, devemos pontuar que os valores médios $(\bar{\lambda}_i, \bar{h}_i)$, os acoplamentos $J_{i,i+1}$ e as funções envelope (A, B) foram escolhidos de modo que o estado fundamental nunca seja degenerado.

Por outro lado, além das condições que as funções envelope (A, B) satisfazem ($A(0) = 0$, $B(0) \neq 0$) e ($A(t_f) \neq 0$, $B(t_f) = 0$), o protocolo é desenhado tal que, para a implementação ideal de cada problema, a adiabaticidade da evolução do seu estado fundamental inicial é

satisfeita com $\sim 99.9975\%$ de fidelidade no final do algoritmo. Depois que o protocolo é configurado na realização ideal de cada problema, determinamos a probabilidade de sucesso para encontrar a respectiva solução onde são consideradas 1024 realizações para flutuações tanto em λ_i como em h_i para determinados valores do desvio padrão σ . Finalmente, consideramos 100 problemas diferentes em nossas simulações.

Nessa ordem de ideias, para quantificar o sucesso da computação usando os processadores fabricados (i.e., incluindo desordem nos parâmetros de interesse), será calculada a probabilidade média de encontrar o estado fundamental ideal final, $|E_0^{(I)}(t_f)\rangle$ a partir do estado fundamental inicial $|E_0^{(\sigma)}(0)\rangle$, como,

$$\overline{P}_S(\sigma) \equiv \overline{\left| \langle E_0^{(I)}(t_f) | U_\sigma(t_f, 0) | E_0^{(\sigma)}(0) \rangle \right|^2},$$

onde $U_\sigma(t_f, 0)$ denota o operador de evolução temporal de uma implementação aleatória escolhida de um ensemble de realizações que seguem uma distribuição Gaussiana com desvio padrão σ e a barra indica a média sobre um número apropriado de realizações, conforme já foi comentado serão 1024.

Logo, escolhemos de maneira conveniente as funções envelope¹

$$A(t) = \hbar\epsilon_0(1 + \cos(\alpha_j t)), \quad (4.1.1)$$

$$B(t) = \hbar\epsilon_0(1 - \cos(\alpha_j t)), \quad (4.1.2)$$

onde $\epsilon_0/2\pi = 318.3\text{MHz}$, α_j é o parâmetro de controle da adiabaticidade e t_f^j corresponde ao tempo da computação os quais devem satisfazer a relação $\alpha_j t_f^j = \pi$, tal que para a realização ideal de cada problema $j \in \{1, 2, \dots, 100\}$ existirá um α_j apropriado que permite encontrar o estado fundamental instantâneo final com uma probabilidade de $\sim 99.9975\%$.

Dessa maneira, para caracterizar a perda de sucesso devido aos desvios dos parâmetros de cada problema, foram simulados ensembles onde em cada problema se tinha somente um dos parâmetros físicos (λ_i ou em h_i) como uma variável aleatória. Os resultados para os ensembles com campos transversais (λ_i) e longitudinais (h_i) aleatórios são mostrados nos painéis (a) e (b), respectivamente da Fig. 4.1.1. Tal que foi encontrado a partir dos 100 problemas que a probabilidade de sucesso é sutilmente afetada devido a desvios do parâmetro λ_i , mesmo quando é considerado um desvio padrão de 10%. Por outro lado, a probabilidade de sucesso média muda drasticamente ao considerar os h_i 's como as variáveis aleatórias do

¹ Note que se é introduzido o parâmetro adimensional $s_j \equiv t/t_f^j$ as funções envelope conseguem ser escritas como $A(s_j) = \hbar\epsilon_0(1 + \cos(\pi s_j))$ e $B(s_j) = \hbar\epsilon_0(1 - \cos(\pi s_j)) \forall j \in \{1, 2, \dots, 100\}$ tal que mantêm o mesmo perfil para cada problema diferente. Note também que esta transformação indica que o Hamiltoniano (2.1.10) pode ser reescrito a ser independente de t_f^j , revelando que apenas uma escala de tempo está presente no problema. (97)

Figura 4.1.1 – Probabilidade de sucesso média $\overline{P}_S$ para ensembles de 1024 realizações, considerando a (a) h_i e (b) λ_i com a única variável aleatória. As probabilidades são mostradas como uma função do desvio padrão porcentual dos respectivos parâmetros. Para o nosso estudo foram considerados $\overline{\lambda}_i = \overline{h}_i = 5$ e $J = 2.5$. Os valores de $\overline{P}_S$ foram calculados para cada 2% de desvio, tal que as linhas somente são uma ajuda para entender o comportamento funcional de $\overline{P}_S$. Cada ponto preto indica a média de $\overline{P}_S$ considerando o conjunto total de 100 problemas analisados por cada valor de σ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

problema. A razão desses comportamentos está fortemente vinculada ao gap mínimo Δ_{min} , mais especificamente, à região onde aparece Δ_{min} .

Com essa afirmação queremos denotar o seguinte: quando a região do gap mínimo, de um problema determinado, está perto do início do protocolo o sistema é dominado principalmente por H_0 , que depende apenas dos parâmetros λ_i , portanto, as imprecisões de λ_i deveriam reduzir mais a probabilidade de sucesso do que no caso quando os campos longitudinais h_i flutuam. Em contraste, quando Δ_{min} está mais próximo do final da computação, a probabilidade de sucesso média é mais afetada por flutuações em h_i que pela desordem em λ_i porque, nesta fase do algoritmo, o Hamiltoniano final é o mais relevante.

Essas afirmações são verificadas a partir da Fig. 4.1.2, onde a perda de sucesso média no caso extremo (desvio padrão dos parâmetros de 10%) é maior quando h_i flutua do que no caso quando λ_i é uma variável aleatória para os problemas cujo gap mínimo aparece tardiamente na computação, e em contrapartida quando aparece cedo o gap, encontramos que a perda de sucesso é um pouco maior no caso quando os λ_i 's flutuam que na situação que os h_i 's são aleatórios.

Figura 4.1.2 – Diferença da probabilidade de sucesso média quando os parâmetros h_i e λ_i flutuam com um 10% de desvio padrão no ensemble dos 100 problemas diferentes: $\bar{P}_{S,h} - \bar{P}_{S,\lambda}$ em função do tempo adimensional $s_{min} \equiv t_{min}/t_f$, tal que t_{min} é o instante no qual o gap mínimo aparece. A diferença tem uma notória dependência com a posição do gap mínimo, tal que se ele aparece “cedo” ou “tardamente” na computação, o valor de $\bar{P}_{S,h} - \bar{P}_{S,\lambda}$ será positivo ou negativo, respectivamente.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Outra assinatura que nos permite caracterizar a perda de sucesso é observada pela análise da frequência de distribuições dos Δ_{min} ’s, tal que aquelas distribuições que apresentam um comportamento disperso ou localizado podem se associar a uma perda de fidelidade alta ou pequena, respectivamente. Essas características de dispersão e localização estão fortemente relacionadas ao momento no qual aparece o gap mínimo durante a computação, conforme pode ser visto nos painéis da Fig. 4.1.3, onde foram calculadas as respectivas distribuições quando os parâmetros tinham flutuações de 10% com respeito a seu valor ideal. Perceba-se que a medida que a posição temporal do gap fica mais longe do início do protocolo a dispersão dos Δ_{min} ’s cresce paulatinamente quando os h_i ’s são flutuantes. O fenômeno é oposto no caso que os λ_i ’s flutuam, pois fica menos dispersa a distribuição dos Δ_{min} ’s quando eles aparecem mais perto do final do algoritmo.

Assim, é claro que para esse conjunto de problemas analisados a baixa sensibilidade da probabilidade de sucesso médio quando λ_i varia (como é visto na Fig. 4.1.1.a), é causado porque as flutuações afetam em menor proporção ao gap que no caso quando h_i muda. Se por exemplo, calcularmos os desvios relativos dos $\Delta_{min}(\lambda)$ e $\Delta_{min}(h)$ associados aos problemas do painéis (a) e (d) da Fig. 4.1.3, tal que nesses problemas o seu respectivo gap mínimo aparece “cedo” e “tarde” respectivamente, encontramos que para o problema com $s_{min} = 0.259$ (no qual os efeitos de λ_i são maiores que em h_i) o desvio relativo do gap mínimo com flutuações

em λ_i é $\sigma_{\Delta_{min}(\lambda)}/\bar{\Delta}_{min}(\lambda) = 0.055$ e em h_i é $\sigma_{\Delta_{min}(h)}/\bar{\Delta}_{min}(h) = 0.011$, tal que em ambos casos o desvio foi $\ll 1$ implicando que a fidelidade seja pouco afetada para esse problema $\bar{P}_S \approx 0.99997$, e para o problema com $s_{min} = 0.808$ temos que $\sigma_{\Delta_{min}(\lambda)}/\bar{\Delta}_{min}(\lambda) = 0.008$ e $\sigma_{\Delta_{min}(h)}/\bar{\Delta}_{min}(h) = 0.501$, tal que nesse caso é evidente que as flutuações em h_i têm maiores efeitos nocivos na fidelidade que variações de λ_i e de fato $\bar{P}_S(h) = 0.924$ e $\bar{P}_S(\lambda) = 0.99996$.

Em virtude desses resultados, podemos perceber que existe uma dependência direta entre a probabilidade de sucesso média e a posição na qual o gap mínimo aparece. Então, a partir dessa característica seria em princípio possível manipular a eficácia de nossa computação, pois se por exemplo tivéssemos suficiente controle sobre os parâmetros dos dispositivos que dominam a dinâmica no começo do protocolo, i.e. os elementos de H_0 de tal forma que as flutuações sejam muito pequenas em λ_i , portanto uma estratégia para obter alto sucesso seria deslocar a posição do gap mínimo próximo da região do início da computação usando para esse propósito uma escolha apropriada das quantidades que temos grande controle, i.e., λ_i e as funções envelope. De maneira equivalente pode-se realizar uma estratégia para o caso quando tem-se um alto domínio nos parâmetros vinculados a h_i tal que neste caso seria necessário deslocar o gap mínimo para o final do protocolo com o objetivo de preservar alta fidelidade.

Também, é realmente importante notar que a maioria dos problemas escolhidos aqui têm o estado fundamental de H_P praticamente insensível a desvios moderados em torno dos valores médios dos parâmetros de h_i 's, em outras palavras, pode-se encontrar que o estado fundamental final instantâneo de cada problema $|E_0^{(I)}(t_f)\rangle$ é praticamente o mesmo para realizações com essas flutuações, i.e.,

$$|E_0^{(I)}(t_f)\rangle = |E_0^{(\sigma(h))}(t_f)\rangle. \quad (4.1.3)$$

Então, vemos que a perda de fidelidade para os problemas que satisfazem (4.1.3) é devida apenas a efeitos dinâmicos. Dessa maneira, podemos definir uma probabilidade dinâmica na qual são removidas da média aquelas realizações físicas que não foram robustas em cada problema, i.e., que não satisfizeram a relação (4.1.3). Logo, podemos definir essa probabilidade como,

$$\bar{P}_{Din}(\sigma) \equiv \overline{\left| \langle E_0^{(\sigma)}(t_f) | U_\sigma(t_f, 0) | E_0^{(\sigma)}(0) \rangle \right|_D^2},$$

tal que evidentemente para cada problema $\bar{P}_{Din}(\sigma) \geq \bar{P}_S(\sigma)$ pois da probabilidade dinâmica são excluídos os erros do estado final (erros estáticos), e a igualdade é satisfeita quando todos as realizações são robustas. Assim, aqueles problemas que tiveram pelo menos uma realização

Figura 4.1.3 – Frequência de distribuição dos gaps mínimos quando o Δ_{min} da realização ideal aparece em (a) $t/t_f \equiv s = 0.259$, (b) $s = 0.289$ (c) $s = 0.674$ e (d) $s = 0.808$ para flutuações em λ_i (azul) e h_i (amarelo) de 10%. Se Δ_{min} aparece cedo no protocolo a amplitude da distribuição é maior no caso quando λ_i flutua que na situação quando h_i é uma variável aleatória. No entanto, se o gap mínimo aparece tardiamente nós encontramos o comportamento contrário, i.e., a amplitude da distribuição quando h_i flutua é maior que no caso λ_i aleatório. Para os casos, (a) e (d) H_P domina em s_{min} e temos que $\bar{P}_{S,h} - \bar{P}_{S,\lambda} < 0$, e pelo outro lado, para (b) e (c) H_0 é mais relevante que H_P na região de Δ_{min} , de modo que $\bar{P}_{S,h} - \bar{P}_{S,\lambda} > 0$. A linha tracejada indica o valor ideal do gap mínimo de cada problema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

não robusta foram analisados exaustivamente calculando uma série de variáveis como aparece na tabela 4.1.

Desse modo, analisando os dados depositados na tabela 4.1 vemos que $\bar{P}_{Din}(\sigma)$ tem uma aparente relação com a posição do gap mínimo médio e o desvio padrão relativo de dito gap. Pois vemos que à medida que a probabilidade diminui a posição do gap era mais perto do final, e o desvio relativo cresce paulatinamente com certas oscilações. Devemos perceber que os valores de $\overline{s_{min}}$ e $\sigma_{\Delta_{min}}/\overline{\Delta_{min}}$ não crescem monotonicamente com o aumento da probabilidade média dinâmica fazendo que eles não sejam perfeitos quantificadores de adiabaticidade para esses problemas. Também para esse problemas foi calculado a média de $Q \equiv \hbar \left| \frac{\langle \phi_1(t_{min}) | \dot{H}(t_{min}) | \phi_0(t_{min}) \rangle}{\min(E_1(t) - E_0(t))^2} \right|$, para o par formado pelo estado fundamental e o primeiro excitado, encontrando que $\bar{Q}$ oscila constantemente, no entanto demonstrando que é uma condição suficiente de adiabaticidade para os problemas analisados pois cada vez que $\bar{Q}$ foi muito menor que 1 a quantidade $\bar{P}_{Din}(\sigma)$ foi próxima da unidade. Pelo fato de não ter achado um quantificador de fidelidade para esses sistemas, pode-se perceber a alta dificuldade que existe para encontrar alguma variável ou condição à qual possa assegurar a adiabaticidade do sistema.

Resumindo, se temos a capacidade de reduzir os erros do estado final e além disso criar alguma estratégia que permita aumentar o valor da probabilidade dinâmica teríamos evidentemente um protocolo com um sucesso maior. Seguindo assim nessa linha de raciocínio e misturando com a evidência encontrada previamente, i.e., a dependência existente entre a probabilidade de sucesso média e a posição do gap mínimo, podemos criar uma estratégia de controle do Hamiltoniano inicial (do qual temos total domínio) para aumentar a probabilidade dinâmica média.

Desse modo, se por exemplo escolhemos o problema que apresentava 54 realizações não robustas, e se reduzirmos o valor ideal de λ_i garantindo que para cada valor ideal de λ_i novamente se atinja uma probabilidade de sucesso $\sim 99.9975\%$, i.e., exigindo que em cada caso (valores diferentes de $\bar{\lambda}_i$) tenha o mesmo valor de probabilidade quando não existe ruído. Então, quando se reduz o valor de $\bar{\lambda}_i$ encontramos que o tempo no qual aparece o gap mínimo se aproxima mais ao início do protocolo como é mostrado na tabela 4.2. Tal que baseados nos resultados prévios é esperado que exista uma atenuação dos efeitos das flutuações de h_i pelo fato que o gap mínimo está numa região onde H_P não é relevante. E de fato, são encontrados valores maiores da probabilidade média cada vez que o valor de $\bar{\lambda}_i$ foi menor, tornando assim nossa estratégia um método candidato para incrementar a fidelidade da computação. Note-se que no caso quando o valor ideal de λ_i foi reduzido dez vezes ganhou 3% de fidelidade e considerando erros exagerados em h_i (desvio padrão de 10%).

Tabela 4.1 – Subconjunto de problemas que apresenta pelo menos uma realização física não robusta quando h_i flutua em 10%, tal que o problema com o maior número de realizações não robustas teve o maior $\overline{s_{min}}$. A listagem mostrada segue uma ordem decrescente da probabilidade dinâmica, revelando que nenhuma variável consegue ter uma funcionalidade biunívoca. Essas variáveis são o gap mínimo médio $\overline{\Delta_{min}}$, o desvio relativo do gap mínimo $\sigma_{\Delta_{min}}/\overline{\Delta_{min}}$, a média de $Q = \hbar \left| \langle \phi_1(t_{min}) | \dot{H}(t_{min}) | \phi_0(t_{min}) \rangle / \min(E_1(t) - E_0(t))^2 \right|$, o desvio relativo de Q $\sigma_Q/\overline{Q}$, o tempo médio no qual aparece o gap mínimo $\overline{t_{min}}$ e o tempo médio relativo é definido como $\overline{s_{min}} = \overline{t_{min}}\alpha_j/\pi$ e α_j depende de cada problema j . As médias foram calculadas unicamente com as realizações robustas.

#Realiz.	$\overline{P_{Din}}$	$\overline{\Delta_{min}}$ [10 ⁹ Hz]	$\sigma_{\Delta_{min}}/\overline{\Delta_{min}}$	$\overline{Q}$ [10 ⁻³]	$\sigma_Q/\overline{Q}$	$\overline{t_{min}}$ [10 ⁻⁹ s]	$\overline{s_{min}}$
1	0.99882	1.79271	0.203009	6.568	0.444	1.83228	0.6386
1	0.99854	1.75059	0.201468	6.619	0.529	1.91627	0.6447
1	0.99848	1.7393	0.19899	7.484	0.452	1.70533	0.6557
4	0.99630	1.54562	0.271744	7.892	0.800	2.16928	0.6995
1	0.99614	1.6256	0.253856	8.271	0.901	1.90586	0.6794
1	0.99571	1.59515	0.261389	7.628	0.751	2.11862	0.6899
7	0.99499	1.54022	0.280315	7.903	0.710	2.20566	0.6986
3	0.99493	1.53248	0.278775	8.375	1.293	2.21031	0.6951
3	0.99473	1.53006	0.288769	8.026	1.099	2.27736	0.7031
2	0.99411	1.56985	0.27462	8.103	1.088	2.15691	0.6955
3	0.99369	1.41917	0.285336	8.683	1.784	2.46166	0.7318
3	0.99350	1.53625	0.289009	9.694	3.327	2.18711	0.7031
5	0.99325	1.51181	0.298602	8.475	1.795	2.29885	0.7076
6	0.99279	1.30412	0.29417	8.879	0.874	2.62738	0.7560
6	0.99271	1.4799	0.295431	8.939	1.737	2.29204	0.7128
4	0.99259	1.33758	0.293131	9.794	3.333	2.60969	0.7509
12	0.99176	1.3795	0.330232	8.705	2.301	2.77154	0.7375
3	0.99101	1.31787	0.313148	8.883	1.132	2.74035	0.7502
8	0.99099	1.40132	0.313225	9.040	2.110	2.6546	0.7326
9	0.99046	1.32233	0.347801	9.039	1.486	2.86846	0.7423
19	0.98964	1.31329	0.349759	10.059	3.878	2.86929	0.7526
10	0.98678	1.22868	0.383105	164.014	30.012	3.45178	0.7669
48	0.96534	1.0877	0.438398	17.561	2.234	2.68168	0.7973
54	0.96338	1.04192	0.465006	25.452	4.945	2.9141	0.8033

Fonte: Elaborada pelo autor

Tabela 4.2 – Dados da estratégia com o intuito de aumentar a probabilidade média por encontrar a solução do problema quando existem flutuações de 10% em h_i num ensemble de 1024 realizações. Nesse caso foi usado um problema que tinha 54 realizações física não robustas cujo gap mínimo médio aparecia perto do final do protocolo $\bar{s}_{min} = 0.803$, tal que a partir da redução dos valores de λ_i conseguiu-se atenuar os efeitos nocivos da aleatoriedade de h_i para assim aumentar consideravelmente a fidelidade do protocolo adiabático. Novamente, a média foi realizada considerando somente as realizações não robustas exceto no cálculo de $\bar{P}_S$ onde foi feita a média com o ensemble completo.

$\bar{\lambda}_i$	$\bar{P}_D$	$\bar{P}_S$	$\bar{s}_{min}$	$\bar{\Delta}_{min}$ [10 ⁹ Hz]	$\frac{\sigma_{\Delta}}{\bar{\Delta}_{min}}$	$\bar{Q}$	$\frac{\sigma_Q}{\bar{Q}}$
5	0.9633	0.9245	0.803	1.042	0.4650	0.0254	4.94
1.5	0.9890	0.9347	0.488	0.647	0.3505	0.0239	25.32
1	0.9904	0.9504	0.355	0.491	0.2878	0.0049	5.35
0.625	0.9972	0.9575	0.230	0.337	0.2025	0.0015	6.58
0.5	0.9977	0.9420	0.208	0.273	0.1946	0.0011	4.85

Fonte: Elaborada pelo autor

4.2 Cadeias de tamanho variável

Um problema de grande interesse é estudar o comportamento da probabilidade de sucesso com uma função do tamanho do sistema. Como não é claro qual comportamento se observará, a simulação de “processadores” com número crescente de qubits se torna imprescindível para se tentar detectar se o problema computacional será escalável ou não. Nesta seção investigamos esse aspecto do sistema para cadeias de tamanho $\{2, 3, 4, 5, 6, 8\}$ considerando desordem nos campos transversais e longitudinais, assim como nos acoplamentos. Para esse caso, foi analisado simplesmente um único problema, cujos valores ideais foram fixados a $\bar{\lambda}_i = 1$, $\bar{h}_i = 5$ e $\bar{J}_{i,i+1} = 2.5$.

Percebamos que aqui, em comparação ao estudo prévio, o valor do campo transversal ideal $\bar{\lambda}_i$ é 5 vezes menor agora. Essa mudança fará que o gap no começo da computação seja evidentemente menor que nos 100 problemas anteriormente analisados, e como veremos em breve será um fator relevante para o comportamento da probabilidade de sucesso média, mas consistente com os achados apresentados até aqui nesta tese.

Nesse específico problema, o protocolo é desenhado de modo similar ao conjunto de problemas anteriormente estudado, i.e., para cada tamanho da cadeia na situação sem flutuações, a adiabaticidade da evolução do estado fundamental inicial é controlada com o objetivo de obter uma probabilidade de sucesso $\sim 99.9975\%$ no final da computação e novamente são usadas as funções envelope 4.1.1 e 4.1.2 tal que agora o parâmetro de controle da adiabaticidade α_N depende do tamanho do sistema ($N \in \{2, 3, 4, 5, 6, 8\}$) e deve satisfazer $\alpha_N t_f^N = \pi$. Só para destacar, reparemos que o gap mínimo decresce monotonicamente com o tamanho

do sistema, cuja característica faz que o algoritmo precise ser rodado mais lentamente para obter a probabilidade desejada cada vez que N aumenta, como pode se observar na Fig. 4.2.1.

Esta diminuição do gap com o tamanho do sistema segue a expectativa formada na comunidade que, exceto por problemas específicos, o gap mínimo irá diminuir em sistemas de muitos qubits, forçando o aumento apreciável do tempo de protocolo. No nosso problema, o comportamento do gap com o tamanho do sistema não apresentou um comportamento exponencial.

Figura 4.2.1 – $\Delta_{\min}$ do sistema (pontos azuis) e o tempo total do protocolo t_f (estrelas vermelhas) como uma função do tamanho das cadeias, N . A duração do protocolo t_f é escolhido para cada N de modo que a adiabaticidade é garantida com $\sim 99.9975\%$ de probabilidade. Quando o tamanho do sistema cresce é necessário um tempo maior para obter a mesma probabilidade, o qual está associado à redução do gap mínimo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Agora, inserindo flutuações nos valores ideais dos campos ou acoplamentos, encontramos a partir dos gráficos das Fig. 4.2.2 que a probabilidade de sucesso decresce mais consideravelmente quando as imperfeições do experimento estão associadas aos parâmetros vinculados a λ_i que nos campos longitudinais e acoplamentos, os quais têm uma perda mínima de fidelidade.

Como foi discutido, o comportamento da probabilidade de sucesso média tem uma estreita relação com o gap mínimo, tal que para esse problema a posição dos $\Delta_{\min}$'s de cada realização estão no início do protocolo para todos os tamanhos das cadeias estudados, i.e., na vizinhança de $s_{\min} = 0.09$. Então, pelo fato que o gap mínimo aparece cedo na computação (tal que nessa região o sistema é dominado por H_0) isto explicaria o comportamento visto na Fig. 4.2.2, pois nessa região inicial o sucesso do protocolo é mais sensível e portanto mais afetado pelas flutuações dos campos transversais que pelos erros dos outros parâmetros importantes do sistemas (h_i e $J_{i,i+1}$).

Figura 4.2.2 – Probabilidade da perda de sucesso média para um ensemble de 1024 realizações, considerando (a) λ_i , (b) h_i e (c) $J_{i,i+1}$ com a única variável aleatória até 10% no desvio padrão. Os resultados são mostrados para diferentes tamanhos do sistema ($N = 2, 3, 4, 5, 6, 8$).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Logo, se analisamos como a distribuição dos 1024 gaps mínimos se modifica dependendo do tamanho da cadeia e principalmente sujeito às flutuações, podemos corroborar a partir das amplitudes de dispersão das distribuições que efetivamente para esse determinado problema as variações em λ_i vão desencadear uma probabilidade de sucesso menor que no caso quando os parâmetros de H_P flutuam, pois as amplitudes tendem a ser maiores em λ_i como pode ser visto na Fig. 4.2.3. Note-se que nesse caso a escala do gap mínimo é 10^8Hz a qual é menor que nos casos que aparecem na Fig. 4.1.3, tal que era evidente que acontecesse pois agora o gap mínimo desse problema ($N = 8$ qubits) é menor.

Voltando à análise dos resultados da Fig. 4.2.2, uma vez entendido a razão para a distinção dos seus comportamentos, podemos passar ao estudo de como a probabilidade de sucesso está sendo degradada à medida que o tamanho aumenta. O que se pode observar é que para um dado nível de ruído, de fato, como esperado, a perda de fidelidade ocorre. Contudo, para os dados coletados nesse estudo, não parece haver uma assinatura de que esta perda de

Figura 4.2.3 – Distribuição dos gaps mínimos Δ_{min} para ensembles com os parâmetros do sistema desordenados: λ_i (painéis a-c); h_i (painéis d-f); e $J_{i,i+1}$ (painéis g-i). Diferentes tamanhos do sistema são mostrados: $N = 2$ (a, d, g); $N = 3$ (b, e, h); $N = 5$ (c, f, i). A linha vertical azul denota o gap mínimo associado à realização ideal, enquanto que a linha vermelha mostra o valor de Δ_{min} médio do ensemble. Todos os ensembles têm 1024 realizações do sistema, cujas variáveis aleatórias têm um desvio padrão relativo do 10%.

Fonte: Elaborada pelo autor.

fidelidade terá um comportamento limitante para a escalabilidade do sistema. De fato, isto parece ser o caso para níveis de ruído que não sejam elevados, dentro da faixa atual de fabricação desses sistemas. Claro que o nosso estudo não pode ser tido como conclusivo, pois um número limitado de tamanhos de sistema foi analisado, mas tais resultados trazem evidências de que o estado da arte na fabricação desses sistemas já tinha alcançado o estágio de permitir a perspectiva de se ter processadores com um número muito grande de qubits. Este fato somado às estratégias desenvolvidas para otimizar e minimizar ruídos, como a nossa apresentada nesta tese, pode continuar a impulsionar o desenvolvimento de processadores cada vez maiores.

Por fim, um aspecto que foi tangenciado até agora, mas que tem extrema relevância no contexto da computação adiabática é a questão de encontrar quantificadores para o nível de adiabaticidade que o protocolo irá dar ao final da evolução. Como comentado na discussão das tabelas 4.1 e 4.2, apesar da análise de diversas quantidades, de caráter completamente distintos, nenhuma destas quantidades revelou-se um quantificador confiável em especial, o gap mínimo e a variação da condição adiabática padrão Q , tal que não apresentaram condições

suficientes para a determinação de quão adiabático o protocolo seria. É importante lembrar que tal preocupação é de grande relevância, pois a identificação do protocolo ideal é peça chave para a computação adiabática e que a sua caracterização através da determinação da evolução é uma tarefa tão difícil quanto o cálculo da solução do problema de interesse, não fazendo sentido se requerer que tal tarefa seja superada. Assim, encontrar quantificadores que sejam razoáveis para a sua determinação é um objetivo de grande importância no qual esta tese se insere. Por conta de tudo que foi exposto, passamos no próximo capítulo a investigar este aspecto da computação/evolução adiabática.

Capítulo 5

CONDIÇÕES DE ADIABATICIDADE EM SISTEMAS NÃO DEGENERADOS

Previamente na seção 2.1.1 foi mostrado o teorema adiabático no qual deveria se garantir que,

$$\max_{t \in [0, t_f]} \left| \frac{\hbar \langle E_1(t) | \dot{H}(t) | E_0(t) \rangle}{(E_1(t) - E_0(t))^2} \right| = \max_{t \in [0, t_f]} \left| \frac{\hbar \langle E_1(t) | \dot{E}_0(t) \rangle}{E_1(t) - E_0(t)} \right| \ll 1, \quad (5.0.1)$$

para manter instantaneamente um sistema fechado não degenerado no seu estado fundamental, tal que em princípio se a evolução fosse infinitamente longa, com modificações infinitesimais do Hamiltoniano do sistema, isso implicaria imediatamente em obter uma dinâmica adiabática segundo esse critério, no entanto um tempo infinito seria algo inviável na prática. Por essa razão, garantir a exigência imposta em (5.0.1) seria menos “custoso” que realizar um protocolo de tempo infinito. Contudo, essa condição de adiabaticidade não chega a ser nem suficiente nem necessária e ainda assim é considerada como a mais tradicional apesar das diversas críticas que têm recebido. (8, 12, 98) Essa condição até estes dias é a mais usada pelo fato que nenhuma outra condição tem conseguido ser suficiente e necessária apesar das inúmeras propostas (97), mostrando assim que é realmente um desafio considerável encontrar uma condição universal de adiabaticidade.

Cabe ressaltar que além da relação (5.0.1) e da ampla lista de quantificadores de adiabaticidade em sistemas fechados (9–11, 97), também existem propostas de condições mais gerais formuladas para sistemas abertos (99–101), no entanto em nenhum caso foi possível demonstrar que alguma delas fosse necessária para determinar a adiabaticidade do sistema, fazendo dessa maneira que exista até esses dias a procura por uma condição suficiente e necessária de adiabaticidade tanto em sistemas fechados como abertos.

Nesse texto, nós estaremos focados em aquelas condições propostas para caracterizar

sistemas sem um ambiente em contato, principalmente em quatro delas, e também será apresentada uma nova condição que nós propomos.

Assim, com o intuito de explorar esse conjunto de condições, permitamos inicialmente estudar um sistema que foi proposto com o fim de verificar a validade dessas quatro condições de adiabaticidade a partir de um experimento de RMN de uma partícula de spin $1/2$ o qual apresenta o fenômeno de ressonância. (12) A dinâmica do sistema é simulada pelo Hamiltoniano,

$$H(t) = -\frac{\Omega}{2} [\cos(\alpha) \sigma_z + \sin(\alpha) (\cos(\omega t) \sigma_x + \sin(\omega t) \sigma_y)] \quad (5.0.2)$$

onde Ω é a frequência de Larmor, ω é a frequência de rotação do campo magnético no plano $X - Y$ e α define a intensidade do acoplamento entre o spin e o campo transversal ($X - Y$), tal que nessa pesquisa foi considerado um acoplamento fraco dado por $\alpha \approx 0.06$. Logo, é possível encontrar analiticamente os autoestados instantâneos de $H(t)$, que escritos na base de σ_z são,

$$\begin{aligned} |E_0(t)\rangle &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ e^{i\omega t} \sin(\alpha/2) \end{pmatrix}, \\ |E_1(t)\rangle &= \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \sin(\alpha/2) \\ -\cos(\alpha/2) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

onde deve-se notar algo interessante desse sistema, que é o fato que apesar que os autoestados dependam do tempo (e de α), seus respectivos autovalores independem explicitamente do tempo, tal que

$$E_{1,0} = \pm \frac{\Omega}{2}.$$

Agora, com o objetivo de analisar a dinâmica do sistema permitamos considerar que se é iniciado no estado fundamental instantâneo $|\Psi(0)\rangle = |E_0(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) \end{pmatrix}$, pode-se proporcionar a partir da equação de Schrödinger dependente do tempo a solução exata do estado global do sistema, o qual é dado por,

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} (\cos(\lambda t/2) - i\frac{\Omega-\omega}{\lambda} \sin(\lambda t/2)) \cos(\alpha/2) e^{-i\omega t/2} \\ (\cos(\lambda t/2) - i\frac{\Omega+\omega}{\lambda} \sin(\lambda t/2)) \sin(\alpha/2) e^{i\omega t/2} \end{pmatrix},$$

onde $\lambda \equiv \sqrt{\Omega^2 + \omega^2 - 2\omega\Omega \cos \alpha}$. Dessa forma, calculando a probabilidade de transição ao

estado excitado,

$$|\langle E_1(t) | \Psi(t) \rangle|^2 = \left[\frac{\omega}{\lambda} \sin(\alpha) \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right]^2,$$

vemos que essa probabilidade oscila entre 0 e $(\omega \sin \alpha / \lambda)^2$ com período $2\pi/\lambda$. A depender dos parâmetros do sistema (α , ω e Ω), o valor máximo desta probabilidade pode chegar a atingir 100% (inversão de população), sinalizando um fenômeno de ressonância. No caso quando $\alpha \ll 1$, tal ressonância acontece na vizinhança da região em que $\omega \approx \Omega$. A Fig.5.0.1.a ilustra o exemplo de ressonância ($\omega = \Omega$) e um outro na situação fora de ressonância ($\omega = 10\Omega$), quando $\alpha \simeq 0.06$. Perceba-se que o comportamento da fidelidade do sistema se manter no mesmo autoestado, $F_0(t) = 1 - |\langle E_1(t) | \Psi(t) \rangle|^2$ muda drasticamente, pois no caso ressonante tem-se inversão completa de população enquanto no outro a dinâmica é praticamente adiabática. Note-se que para esse sistema sempre existirá um mínimo de fidelidade em $t = \pi/\lambda$, i.e., $F_0(\pi/\lambda) \equiv F_{min}$ conforme se observa na Fig.5.0.1.b, onde pode se notar que este sistema permanece com um mínimo de fidelidade bem alto apesar que α não seja muito menor que 1 e desde que o sistema se mantenha longe da região de ressonância.

Fidelidade

Figura 5.0.1 – Efeitos da ressonância do sistema na fidelidade para manter o sistema no mesmo autoestado durante toda a evolução. (a) Nesse gráfico foi usado um valor de $\alpha \approx 0.06$, tal que a linha azul representa a situação do sistema em ressonância ($\omega = \Omega$) e a linha laranja quando está fora da ressonância ($\omega/\Omega = 10$) tal que o tempo total da dinâmica foi $t_f = 2\pi/(0.06\Omega)$ o que representa vários ciclos do caso fora da ressonância. (b) Comportamento da fidelidade mínima, $F_{min} = F_0(\pi/\lambda)$ em função de α e a razão entre ω e Ω , tal que fica em evidência que fora da ressonância e para valores pequenos de α a evolução é adiabática. Quando α começa ficar maior existe uma pequena perda de fidelidade mesmo para $\omega \gg \Omega$. Nesses casos foram considerados $\Omega = 2\pi \times 1700$ Hz e como condição inicial o estado fundamental instantâneo $|E_0(0)\rangle$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Dessa forma, se calcularmos a condição tradicional de adiabaticidade para esse sistema,

encontramos que,

$$C_1 \equiv \left| \frac{\langle E_1(t) | \dot{E}_0(t) \rangle}{E_1(t) - E_0(t)} \right| = \frac{\omega |\sin \alpha|}{2\Omega}, \quad (5.0.3)$$

o qual independe do tempo, e é esperado que seja muito menor que 1 quando o sistema está fora da ressonância pelo fato que existe uma evolução totalmente adiabática, e ter um valor maior para o caso na ressonância por causa da inversão de população. No entanto, para o exemplo da Fig. 5.0.1.a encontramos o resultado oposto, i.e., C_1 é 10 vezes maior para o caso sem ressonância que no caso com ressonância, mostrando desse modo que a relação C_1 não é uma condição nem necessária e nem suficiente para garantir adiabaticidade nesse sistema.

Continuando com a análise de outros critérios de adiabaticidade, temos por um lado as condições introduzidas por Tong e colaboradores (10), tal que nesse caso devem se satisfazer 3 relações para manter uma dinâmica adiabática, tal que para o Hamiltoniano (5.0.2) se é garantindo somente que,

$$\begin{aligned} C_2 &\equiv \int_0^{t_f} d\tau \left| \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\langle E_n(\tau) | \dot{E}_m(\tau) \rangle}{E_n(\tau) - E_m(\tau)} \right) \right| \\ &= \frac{\omega^2 |\sin \alpha|}{2\Omega} t_f \end{aligned} \quad (5.0.4)$$

seja muito menor do que 1 consegue se satisfazer as outras duas relações¹. Dessa maneira, se plotarmos a C_2 como pode ser visto na Fig. 5.0.2, onde o tempo total da evolução é dado por $t_f = 2\pi/\lambda$, observamos que $C_2 \ll 1$ quando $\omega \ll \Omega$ tornando a condição válida nessa região pois o sistema se mantém no mesmo autoestado durante toda a evolução como foi mostrado na Fig. 5.0.1.b. Contudo, quando $\omega \gg \Omega$, a condição começa crescer apesar que a fidelidade do sistema para se manter no mesmo autoestado é praticamente 1 quando α aumenta, fazendo assim que C_2 seja uma condição não necessária de adiabaticidade.

¹ As outras duas relações são: (i) $A = C_1 = \left| \frac{\langle E_1(t) | \dot{E}_0(t) \rangle}{E_1(t) - E_0(t)} \right| = \frac{\omega |\sin \alpha|}{2\Omega}$ tal que $C_2/A = \omega t_f > 1$ para os valores usados no experimento, e (ii) $C = \int_0^{t_f} d\tau \left| \left(\frac{\langle E_n(\tau) | \dot{E}_m(\tau) \rangle}{E_n(\tau) - E_m(\tau)} \right) \right| |\langle E_n(\tau) | \dot{E}_m(\tau) \rangle| = \frac{\omega^2 |\sin \alpha|^2}{4\Omega} t_f$, tal que $C/C_2 = |\sin \alpha|/2 < 1$. Portanto se $C_2 \ll 1$, as quantidades A e C também serão, e dessa maneira somente precisamos analisar a C_2 .

Figura 5.0.2 – Comportamento da quantificador $C_2 = \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 \frac{\pi \sin \alpha}{\sqrt{1 + \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 - 2 \frac{\omega}{\Omega} \cos \alpha}}$ em função da razão (ω/Ω) e α , mostrando que não é uma condição necessária de adiabaticidade pois apesar que o sistema apresenta um regime adiabático fora da ressonância, o quantificador C_2 é > 1 na maior parte destas regiões.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Outra condição de adiabaticidade foi proposta por Wu e colaboradores (11, 102), cuja exigência pode se escrever como,

$$C_3 = \left| \frac{\langle E_1(t) | \dot{E}_0(t) \rangle}{\frac{d}{dt} \arg [d_{10}(t)] + E_0 - E_1 + i \langle E_1(t) | \dot{E}_1(t) \rangle - i \langle E_0(t) | \dot{E}_0(t) \rangle} \right| \ll 1 \quad (5.0.5)$$

$$= \frac{\omega |\sin \alpha|}{2|\Omega - \omega \cos \alpha|},$$

tal que nesse critério cada vez que foi satisfeito, o sistema apresentava uma dinâmica adiabática. Por outro lado, na região próxima da ressonância, $\omega \approx \Omega$ o valor de C_3 cresce rapidamente como é visto na Fig. 5.0.3 e vai de acordo com o comportamento da fidelidade pois ela diminui drasticamente. Desse modo, podemos dizer que C_3 chega a ser uma condição suficiente para esse problema, mas sem saber se é realmente necessária para garantir adiabaticidade nesse sistema.

Figura 5.0.3 – Funcionalidade de C_3 em termos de α e a razão entre os parâmetros ω e Ω . Para o caso desse quantificador vemos como consegue ser uma condição suficiente pois sempre que o sistema apresentava uma dinâmica adiabática C_3 foi $\ll 1$. Quando o sistema entra em ressonância, a evolução deixa de ser totalmente adiabática tal que C_3 começa crescer rapidamente na região $\omega \approx \Omega$.

Fonte: Elaborada pelo autor

Finalmente, mais um quantificador de adiabaticidade proposto dessa vez pelo Ambainis e Regev (9), no qual foi estabelecida uma distância $\delta > 0$ entre o estado final global e o estado final instantâneo que satisfaz,

$$\delta^2 \geq \frac{10^5}{t_f} \max \left\{ \frac{\|H'\|^3}{\Delta_{min}^4}, \frac{\|H'\| \|H''\|}{\Delta_{min}^3} \right\},$$

onde $\|O\|$ é definido como $\sqrt{\lambda_{\max}(O^\dagger O)}$, i.e., a raiz quadrada do máximo autovalor de $O^\dagger O$, $H' = t_f dH/dt$, $H'' = t_f^2 d^2 H/dt^2$ e tem se incluído 10^5 de maneira conveniente e arbitrária. Dessa forma, para o sistema de nosso estudo deve se satisfazer,

$$\begin{aligned} C_4 &\equiv A \max \left\{ \frac{\|H'\|^3}{\Delta_{min}^4}, \frac{\|H'\| \|H''\|}{\Delta_{min}^3} \right\} \frac{1}{t_f} \ll 1 \\ &= A \max \left\{ \frac{\sin \alpha}{2}, 1 \right\} \frac{\omega^3 \sin^2 \alpha}{4\Omega} t_f^2 \\ &= A \frac{\omega^3 \sin^2 \alpha}{4\Omega} t_f^2 \end{aligned} \tag{5.0.6}$$

tal que em A estão incluídos todos os elementos constantes, e se é de novo considerado um tempo da evolução dado por $t_f = 2\pi/\sqrt{\Omega^2 + \omega^2 - 2\omega\Omega \cos \alpha}$, podemos plotar C_4 (e desprezando os termos constantes: A e π^2) conseguindo assim a Fig. 5.0.4. Note-se que

quando $\omega \ll \Omega$ a condição é satisfeita, no entanto quando $\omega \gg \Omega$ e $\alpha \sim 0.3$ a condição adiabática não é satisfeita pois $C_4 \sim 1$, apesar que o sistema se comporta praticamente adiabático. Portanto, C_4 é uma condição suficiente para adiabaticidade, pois sempre que C_4 foi $\ll 1$ o sistema teve uma fidelidade de 1.

Figura 5.0.4 – Caracterização de C_4 em função de α e a relação entre ω e Ω . Esse quantificador resulta ser uma condição necessária de adiabaticidade pois na situação na qual o C_4 foi menor do que 1 o sistema tinha uma fidelidade de um. Vemos como C_4 cresce a medida que α e ω/Ω aumentam apesar que exista nessa região uma dinâmica quase adiabática.

Fonte: Elaborada pelo autor

Consequentemente, podemos dizer que dos critérios anteriormente descritos alguns conseguem ser condições suficientes para o sistema estudado, mas nenhum foi uma condição necessária para garantir uma dinâmica adiabática. Deixando ainda em aberto essa questão de obter um critério universal de adiabaticidade.

5.1 Proposta de uma nova condição de adiabaticidade

Motivados pela inexistência de um consenso geral de uma condição de adiabaticidade, aqui é apresentada uma relação que permite sinalizar a existência de uma dinâmica adiabática. (103) Com o fim de demonstrar que é uma condição suficiente e talvez necessária (pois ainda não foi realizada uma prova formal para afirmar isso) e com o intuito de ganhar domínio sobre as características da dinâmica, focaremos inicialmente na situação de um sistema de dois níveis e após esta análise passaremos à apresentação geral de muitos níveis. Assim, para o caso de dois níveis a condição será testada em três sistemas de dois níveis de características diferentes: com e sem ressonância. Para o caso de muitos níveis serão estudados dois sistemas

de 3 e 8 níveis. E finalmente, para ambos casos será verificada sua consistência de maneira formal.

5.1.1 Dedução matemática

Permitamos inicialmente escrever o estado quântico $|\Psi(t)\rangle$ de um sistema cuja dinâmica é governada pela equação de Schrödinger $i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle$, em termos da base instantânea $|E_n(t)\rangle$ ($\hat{H}(t)|E_n(t)\rangle = E_n(t)|E_n(t)\rangle$) e deixando em evidência a fase dinâmica $\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')$, como,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |E_n(t)\rangle.$$

Da subseção 2.1.1 temos as seguintes relações entre os elementos da base,

$$\begin{aligned} i\langle E_m(t)|\dot{E}_m(t)\rangle &\in \mathbb{R}, \\ \langle E_m(t)|\dot{E}_n(t)\rangle &= \frac{\langle E_m(t)|\dot{H}|E_n(t)\rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \equiv d_{n,m}(t), \quad (n \neq m), \end{aligned}$$

Por outro lado os coeficientes $c_m(t)$ satisfazem o sistema de equações diferenciais acopladas,

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle E_m(t)|\dot{E}_m(t)\rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) d_{n,m} e^{i(\theta_n - \theta_m)}$$

de modo que se é definido

$$c_m(t) \equiv a_m(t) e^{-\int_0^t dt' \langle E_m(t')|\dot{E}_m(t')\rangle},$$

vemos que,

$$\dot{a}_m(t) = - \sum_{n \neq m} a_n(t) d_{n,m}(t) e^{-\gamma_{nm}} e^{i\theta_{nm}}, \quad (5.1.1)$$

onde

$$\gamma_{nm}(t) \equiv \int_0^t dt' \left(\langle E_n(t')|\dot{E}_n(t')\rangle - \langle E_m(t')|\dot{E}_m(t')\rangle \right), \quad (5.1.2)$$

$$\theta_{nm}(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' (E_n(t') - E_m(t')). \quad (5.1.3)$$

Agora, se analisarmos a situação mais simples que consiste de um sistema de dois níveis e depois indo ao caso geral de muitos níveis, obtemos a partir de (5.1.1) o seguinte par de

equações,

$$\begin{aligned}\dot{a}_0 &= -a_1 d_{10} e^{-\gamma_{10}} e^{i\theta_{10}}, \\ \dot{a}_1 &= -a_0 d_{01} e^{-\gamma_{01}} e^{i\theta_{01}},\end{aligned}$$

e pelo fato que $\gamma_{10} = -\gamma_{01}$, $\gamma_{10} = -\gamma_{10}^*$, $\theta_{10} = -\theta_{01}$, $\theta_{10} = \theta_{10}^*$ e $d_{01} = -d_{10}^*$, podemos reescrever elas como,

$$\begin{aligned}\dot{a}_0 &= -a_1 d_{10} e^{-\gamma_{10}} e^{i\theta_{10}} \equiv -g a_1, \\ \dot{a}_1 &= a_0 d_{10}^* e^{-\gamma_{10}^*} e^{-i\theta_{10}} \equiv g^* a_0,\end{aligned}$$

as quais podem se escrever de maneira mais compacta como,

$$\frac{d\vec{a}(t)}{dt} = \begin{pmatrix} 0 & -g(t) \\ g^*(t) & 0 \end{pmatrix} \vec{a}(t), \quad (5.1.4)$$

onde temos definido o vector $\vec{a}(t) \equiv \begin{pmatrix} a_0(t) \\ a_1(t) \end{pmatrix}$. Observe-se que se multiplicamos ambos lados de (5.1.4) por i , encontramos que a dinâmica de $\vec{a}(t)$ é determinada pela equação tipo Schrödinger $\frac{id\vec{a}}{dt} = h\vec{a}$, onde h é uma matriz Hermitiana,

$$h(t) \equiv \begin{pmatrix} 0 & -ig(t) \\ ig^*(t) & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.5)$$

tornando assim a evolução de $a(t)$ unitária e permitindo que a norma se preserve, i.e., $|\vec{a}(t)|^2 = |\vec{a}(0)|^2 = 1$. Agora, observe-se que $h(t)$ pode-se escrever na base de σ_z em termos das matrizes de Pauli como,

$$h(t) = -i \frac{g(t) - g^*(t)}{2} \sigma_x + \frac{g(t) + g^*(t)}{2} \sigma_y,$$

tal que $[h(t), h(t')] \neq 0 \ \forall t \neq t'$ ².

Logo, com o objetivo de introduzir uma condição adiabática devemos ter claro que a existência de uma condição adiabática “forte” imporia que $a_n(t) = a_n(0)$, e em contrapartida, uma condição “fraca” seria aquela na qual apenas as populações são relevantes, i.e., uma condição que consiga satisfazer $|a_n(t)| = |a_n(0)|$.

Em primeiro lugar, para obter a condição forte, lembremos que a dinâmica de $\vec{a}(t)$ é

² Devemos deixar claro que h não é o Hamiltoniano do sistema físico, pois o estado físico global é, $|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-\int_0^t dt' \langle \phi_n(t) | \phi_n(t) \rangle} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')} |\phi_n(t)\rangle$.

regida pela equação,

$$\frac{id^2\vec{a}}{dt} = h\vec{a}, \quad (5.1.6)$$

tal que se derivarmos no tempo mais uma vez vemos que,

$$\begin{aligned} \frac{id^2\vec{a}}{dt^2} &= \frac{dh}{dt}\vec{a} + h\frac{d\vec{a}}{dt} \\ &= \frac{dh}{dt}\vec{a} + h(-ih\vec{a}) \\ &= \left(\frac{dh}{dt} - ih^2\right)\vec{a}, \end{aligned}$$

e se é imposto que,

$$\left\|\frac{dh}{dt}\right\| \gg \|h^2\|, \quad (5.1.7)$$

onde $\|O\| = \sqrt{\lambda_{\max}(O^\dagger O)}$, encontramos que,

$$i\frac{d^2\vec{a}}{dt^2} = \frac{d}{dt}(h\vec{a}) \approx \frac{dh}{dt}\vec{a},$$

de modo que sob essa aproximação notamos que,

$$a_n(t) \approx \text{cte.},$$

ou seja, garantindo a condição forte $a_n(t) \approx a_n(0)$. E de maneira mais explícita pode-se escrever a relação (5.1.7) para o caso de dois níveis como,

$$\frac{|d_{10}|^2}{\left|\frac{d}{dt}(d_{10}e^{-\gamma_{10}}e^{i\theta_{10}})\right|} \ll 1. \quad (5.1.8)$$

Note-se que se fizermos $d_{10}(t) \equiv |d_{10}|e^{i\arg(d_{10})}$ podemos escrever $d_{10}e^{-\gamma_{10}}e^{i\theta_{10}}$ como $|d_{10}(t)|e^{i\vartheta(t)}$, onde $\vartheta(t) \equiv \arg(d_{10}) + i\gamma_{10} + \theta_{10} \in \mathbb{R}$ e dessa forma o denominador de (5.1.8) é igual a,

$$\begin{aligned} \left|\frac{d}{dt}(|d_{10}(t)|) + i|d_{10}(t)|\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right| &= |d_{10}(t)|\left|\frac{1}{|d_{10}(t)|}\frac{d}{dt}(|d_{10}(t)|) + i\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right| \\ &= |d_{10}(t)|\left|\frac{d}{dt}(\ln |d_{10}(t)|) + i\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right| \\ &= |d_{10}(t)|\sqrt{\left(\frac{d}{dt}(\ln |d_{10}(t)|)\right)^2 + \left(\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right)^2}, \end{aligned}$$

onde temos usado na última linha o fato que $\{|d_{10}(t)|, \vartheta(t)\} \in \mathbb{R}$, e assim finalmente a condição (5.1.8) tem a forma,

$$\frac{|d_{10}(t)|}{\sqrt{\left(\frac{d}{dt}(\ln |d_{10}(t)|)\right)^2 + \left(\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right)^2}} \ll 1, \quad (5.1.9)$$

tal que 5.1.8 (ou 5.1.9) será nossa condição forte proposta. Perceba-se que se é considerado um sistema tal que $\frac{d}{dt}|d_{10}| = 0$, o lado esquerdo de (5.1.9) é igual a

$$\frac{|d_{10}(t)|}{\left|\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right|} = \frac{|d_{10}(t)|}{\left|\frac{d}{dt}(\arg(d_{10}(t)) + i\gamma_{10}(t) + \theta_{10}(t))\right|} = C_3(t), \quad (5.1.10)$$

onde evidentemente $\frac{|d_{10}(t)|}{\sqrt{\left(\frac{d}{dt}(\ln |d_{10}(t)|)\right)^2 + \left(\frac{d}{dt}(\vartheta(t))\right)^2}} \leq C_3(t)$, sendo assim C_3 um caso particular de nosso critério e tendo como consequência que nossa condição poderia ser em princípio suficiente para preservar uma dinâmica adiabática.

Em segundo lugar, um método para encontrar a condição fraca poderia ser feito a partir de induzir uma dinâmica em $\vec{a}(t)$ governada por um “hamiltoniano” efetivo h_{eff} que comute com σ_z , tal que essa imposição no sistema faria com que as populações não variem no tempo. Essa condição que nós procuramos a partir de criar uma dinâmica efetiva lembra a situação física de uma perturbação harmônica de um sistema de dois níveis, regido pelo Hamiltoniano,

$$\hat{h}(t) = \frac{\Omega}{2} (|0\rangle\langle 1|e^{i\Delta t} + h.c.),$$

tal que se $\Omega/\Delta \ll 1$ garantiria que a dinâmica seja governada agora por um Hamiltoniano efetivo definido como (104),

$$\hat{h}_{eff}(t) = -\frac{\Omega^2}{4\Delta} (|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|).$$

Portanto, seguindo essa motivação, permitamos inicialmente definir uma matriz unitária $u(t)$ tal que $\vec{a}(t) = u(t)\vec{a}(0)$, onde $u(t)$ representa uma matriz de evolução temporal,

$$u(t) = \overleftarrow{T} e^{-i \int_0^t dt' h(t')}.$$

tal que a série de Dyson para $u(t)$ seria,

$$u(t) = \mathbb{I} - i \int_0^t dt' h(t') + (-i)^2 \int_0^t dt' dt'' h(t') h(t'') + \dots$$

Perceba-se agora, que os termos pares em h comutam com σ_z pois,

$$\begin{aligned} h(t')h(t'') &= \begin{pmatrix} g(t')g^*(t'') & 0 \\ 0 & g^*(t')g(t'') \end{pmatrix} \\ &= \frac{g(t')g^*(t'') + g^*(t')g(t'')}{2}\mathbb{I} + \frac{g(t')g^*(t'') - g^*(t')g(t'')}{2}\sigma_z, \end{aligned}$$

de modo que se agruparmos os termos ímpares e pares de $u(t)$, obteríamos que,

$$\begin{aligned} u(t) &= \left(\mathbb{I} + (-i)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' h(t')h(t'') + O(h^4) \right) \\ &\quad \left(-i \int_0^t dt' h(t') + (-i)^3 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \int_0^{t''} dt''' h(t'')h(t''') + O(h^5) \right), \end{aligned}$$

onde deve-se observar que os termos pares e ímpares em h estão associados a espécies diferentes de operadores. Por um lado, os elementos pares são diagonais na base de σ_z e por outro lado, os ímpares anti-diagonais, por conseguinte, se é garantido que os termos ímpares sejam negligenciáveis podemos descrever a dinâmica de $\vec{a}(t)$ a partir de um operador de evolução temporal diagonal como é desejado. Finalmente, tudo isso é garantido se a condição

$$\left\| \int_0^t dt' h(t') \right\| = \left| \int_0^t dt' g(t') \right| \ll 1, \quad \forall t \in [0, t_f] \quad (5.1.11)$$

é satisfeita e permite assim desprezar os termos ímpares, pois os termos de ordem superior vão ser cada vez menores.

Agora, se integrarmos nossa condição fraca de adiabaticidade (5.1.11) vemos que,

$$\begin{aligned}
\left| \int_0^t dt' g(t') \right| &= \left| \int_0^t dt' |d_{10}(t')| e^{i\vartheta(t')} \right| \\
&= \left| |d_{10}(t)| \int_0^t dt' e^{i\vartheta(t')} - \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} |d_{10}(t')| \left[\int_0^{t'} dt'' e^{i\vartheta(t'')} \right] \right| \\
&= \left| |d_{10}(t)| \left\{ \frac{e^{i\vartheta(t)}}{i\dot{\vartheta}(t)} \right\}_0^t + \int_0^t dt' e^{i\vartheta(t')} \frac{\ddot{\vartheta}(t')}{\dot{\vartheta}(t')^2} \right\} \\
&\quad - \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} |d_{10}(t')| \left\{ \frac{e^{i\vartheta(t')}}{i\dot{\vartheta}(t')} \right\}_0^{t'} + \int_0^{t'} dt'' e^{i\vartheta(t'')} \frac{\ddot{\vartheta}(t'')}{\dot{\vartheta}(t'')^2} \right\} \Big| \\
&= \left| |d_{10}(t)| \left\{ \left(\frac{e^{i\vartheta(t)}}{i\dot{\vartheta}(t)} - \frac{1}{i\dot{\vartheta}(0)} \right) + \int_0^t dt'' e^{i\vartheta(t'')} \frac{\ddot{\vartheta}(t'')}{\dot{\vartheta}(t'')^2} \right\} \right. \\
&\quad \left. - \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} |d_{10}(t')| \left\{ \left(\frac{e^{i\vartheta(t')}}{i\dot{\vartheta}(t')} - \frac{1}{i\dot{\vartheta}(0)} \right) + \int_0^{t'} dt'' e^{i\vartheta(t'')} \frac{\ddot{\vartheta}(t'')}{\dot{\vartheta}(t'')^2} \right\} \right| \\
&= \left| |d_{10}(t)| \left\{ \frac{e^{i\vartheta(t)}}{i\dot{\vartheta}(t)} + \int_0^t dt' e^{i\vartheta(t')} \frac{\ddot{\vartheta}(t')}{\dot{\vartheta}(t')^2} \right\} \right. \\
&\quad \left. - \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} |d_{10}(t')| \left\{ \frac{e^{i\vartheta(t')}}{i\dot{\vartheta}(t')} + \int_0^{t'} dt'' e^{i\vartheta(t'')} \frac{\ddot{\vartheta}(t'')}{\dot{\vartheta}(t'')^2} \right\} \right|, \tag{5.1.12}
\end{aligned}$$

onde temos usado novamente a definição $\vartheta(t) \equiv \arg[d_{10}(t)] + \theta_{10}(t) + i\gamma_{10}(t)$ e a relação $\frac{1}{i\dot{\vartheta}} \frac{d}{dt} e^{i\vartheta} = e^{i\vartheta}$. Note-se que se considerarmos um sistema do mesmo tipo que o descrito pelo Hamiltoniano (5.0.2), onde $\vartheta(t)$ é linear no tempo e $|d_{10}(t)|$ não depende do tempo vemos que (5.1.12) é reduzida a,

$$\begin{aligned}
\left| \int_0^t dt' g(t') \right| &= \left| |d_{10}| \frac{e^{i\vartheta(t)}}{i \frac{d}{dt} \arg[d_{10}(t)] + i\dot{\theta}_{10}(t) - \dot{\gamma}_{10}(t)} \right| \\
&= \left| \frac{|\langle E_1(t) | \dot{E}_0(t) \rangle|}{\frac{d}{dt} \arg[d_{10}(t)] + E_0 - E_1 + i\langle E_1(t) | \dot{E}_n(t) \rangle - i\langle E_0(t) | \dot{E}_0(t) \rangle} \right| \\
&= C_3(t),
\end{aligned}$$

chegando novamente à condição geral de Wu e colaboradores.

Devemos perceber que apesar que (5.1.11) seja uma condição fraca ela requer mais imposições no sistema que no caso forte (5.1.8), pois no caso fraco desconsidera-se a possibilidade da soma de infinitos termos (ímpares) se cancelar, mesmo sem se ter (5.1.11) satisfeita. Portanto, nós propomos a condição forte como uma nova condição de adiabaticidade por questões

de demanda e dessa forma a seguir apresentamos alguns exemplos que permitem testar sua validade.

5.1.2 Exemplos

Com o intuito de revisar a confiabilidade de nossa condição (forte), na continuação iremos analisar três sistemas de dois níveis, tal como já dissemos anteriormente serão sistemas com e sem ressonância. Em virtude disso, inicialmente vamos estudar um sistema que não apresenta ressonâncias descrito pelo Hamiltoniano de Landau Zener,

$$\hat{H}_{LZ}(t) = -\frac{|\Delta|}{2}\sigma_x - \frac{|\alpha|t}{2}\sigma_z,$$

tal que se analisarmos as 4 condições previamente formuladas vemos que para esse específico problema C_1 é equivalente a C_3 pelo fato que H_{LZ} é um Hamiltoniano real, e da mesma forma nosso quantificador,

$$C_p \equiv \frac{|d_{10}(t)|^2}{\left| \frac{d}{dt} (d_{10}(t)e^{-\gamma_{10}(t)}e^{i\theta_{10}(t)}) \right|} = \frac{|d_{10}(t)|}{\sqrt{\left(\frac{d}{dt} (\ln |d_{10}(t)|) \right)^2 + \left(\frac{d}{dt} (\vartheta(t)) \right)^2}} \quad (5.1.13)$$

chega ser equivalente a C_1 . Para esse sistema, todos os critérios conseguem ser válidos, já que em todos os casos existe um aumento do valor máximo de cada condição quando a probabilidade de encontrar o sistema no mesmo autoestado durante toda a evolução diminui como pode ser observado nas Figs. 5.1.1.

Agora, analisando o sistema descrito pelo Hamiltoniano (5.0.2), do qual já fizemos um estudo quantitativo para os diferentes C_i ($i \in \{1, 2, 3, 4\}$) onde encontramos que a melhor condição era a C_3 pelo fato de conseguir ser suficiente, mas sem demonstrar ser necessária. Para esse sistema, o quantificador que nós propomos é igual a C_3 novamente pois a quantidade $|\langle E_1(t) | \dot{E}_0(t) \rangle|$ independe do tempo, fazendo que eles sejam equivalentes como foi mostrado em (5.1.10).

Figura 5.1.1 – Comportamento do mínimo de probabilidade para manter o sistema no estado fundamental durante a dinâmica em função dos máximos das diferentes condições de adiabaticidade $\{C_1, C_2, C_3, C_4, C_p\}$, tal que $C_1 = C_3 = C_p$. Verificando assim que cada condição, inclusive a nossa, pode ser usada como quantificador para esse sistema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Previamente tinha se argumentado que baseados nesse sistema (quando $\alpha \ll 1$ e $\omega \ll \Omega$ ou $\omega \gg \Omega$, como pode se ver na Fig. 5.0.3) o C_3 conseguia representar uma condição suficiente de adiabaticidade e portanto a nossa também teria as mesmas características. Então, com o objetivo de estender nosso critério (e portanto o C_3 também) e ver sua validade foi calculado como o mínimo de probabilidade para se manter no mesmo autoestado varia quando α cresce e tomando valores de ω quando é $\ll \Omega$ até $\gg \Omega$. Dessa maneira, foi encontrado que C_p ainda é uma condição suficiente para sinalizar a existência de uma dinâmica adiabática, como pode ser visto na Fig. 5.1.2, pois como observamos nas respectivas figuras, à medida que o mínimo de probabilidade se reduz, o quantificador vai aumentando progressivamente.

Também, usando esse sistema é possível encontrar que nossa condição consegue ser uma função biunívoca, i.e., para cada valor do mínimo de probabilidade de sucesso é associado um único valor de nosso quantificador, tal como pode ser visto nos painéis (a) e (b) da Fig. (5.1.3), nos quais foram comparados os valores obtidos dos painéis (b), (c) e (d), (e) da Fig. (5.1.2) respectivamente. Tornando dessa forma que C_p revalide sua consistência como uma condição de adiabaticidade.

Figura 5.1.2 – Dependência do mínimo de probabilidade por encontrar o sistema no estado excitado instantaneamente em função de C_p quando (a) $\omega/\Omega = 1 \times 10^{-4}$, (b) $\omega/\Omega = 1 \times 10^{-2}$, (c) $\omega/\Omega = 1 \times 10^{-1}$, (d) $\omega/\Omega = 1$ e (e) $\omega/\Omega = 10$. À medida que α é variado desde 0.001π até π o mínimo da probabilidade de sucesso decresce dependendo da relação entre ω e Ω , tal que nos casos com $\omega \ll \Omega$ a dinâmica é praticamente adiabática.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 5.1.3 – Prova da característica biunívoca da condição C_p a partir do estudo do sistema descrito pelo Hamiltoniano (5.0.2) para distintos valores da relação ω/Ω . Encontrando que essa condição resulta ter um comportamento biunívoco e reafirmando assim sua consistência.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Por último, o terceiro sistema que vamos estudar é um sistema que permite encontrar diferenças entre C_3 e C_p , pois até agora mostramos Hamiltonianos onde essas duas condições resultavam ser iguais. Em virtude disso, a continuação apresentaremos um sistema no qual nossa condição quantifica a adiabaticidade de um sistema enquanto no caso de C_3 é quebrado o critério. Esse sistema é descrito pelo Hamiltoniano,

$$H(t) = -\frac{1}{2}\Delta(\sin(\Gamma t)\sigma_x - \cos(\Gamma t)\sigma_z) - \frac{1}{2}\epsilon\sigma_z,$$

tal que se analisamos a fidelidade por encontrar o sistema no seu estado fundamental num intervalo específico, vemos que o sistema resulta ter uma dinâmica adiabática nesse trecho onde tem se usado os parâmetros adequados para tal fim, como pode ser observado na Fig. 5.1.4.a.

Logo, explorando as respectivas condições, C_3 e C_p observamos a partir da Fig. 5.1.4.b que C_p sempre é $\leq C_3$, e sendo $C_p \ll 1$ durante todo o intervalo de análise, mostrando assim que nosso quantificador é válido para esse sistema. No entanto, pode-se constatar no mesmo gráfico que C_3 não resulta ser muito menor que 1, apesar que exista um comportamento adiabático no sistema, descartando ele como uma condição necessária de adiabaticidade.

Desse modo, concluímos que nosso critério para indicar uma dinâmica adiabática foi sempre uma condição suficiente para todos os exemplos que foram apresentados aqui e além disso nunca existiu uma evidência para não ser uma condição necessária, portanto nosso quantificador poderia ser um bom candidato para quantificar adiabaticidade.

Figura 5.1.4 – Análise dos quantificadores C_3 e C_p quando é estudado um Hamiltoniano que proporciona valores diferentes para essas condições. Se é explorado um intervalo da evolução no qual existe uma fidelidade de quase 1 vemos que a condição C_3 apresenta valores que não são suficientemente baixos enquanto no caso de C_p vemos como ele é $\ll 1$ durante todo o intervalo de análise.

Fonte: Elaborada pelo autor.

5.1.3 Consistência de C_p

Seguindo com o objetivo de obter evidências sobre nossa condição para acrescentar na demonstração de sua validade, nós realizamos uma prova de “consistência”.

Esse critério de consistência, o qual aparece em detalhe nos trabalhos de Sanders (98) e Tong (8), revela que se um sistema governado por um Hamiltoniano $H^A(t)$ segue uma evolução adiabática, então um segundo sistema B cujo Hamiltoniano é definido através do operador de evolução temporal de A , $U^A(t)$,

$$H^B(t) = -U^{A\dagger}(t)H^A(t)U^A(t), \quad (5.1.14)$$

não pode ter uma dinâmica adiabática a menos que a base instantânea de A seja inalterada, i.e.,

$$|\langle E_n^A(t) | E_n^A(0) \rangle| \simeq 1.$$

Desse modo, se a base em A varia então qualquer condição de adiabaticidade que seja satisfeita nos dois sistemas deverá ser considerada inconsistente. Usando esse critério de consistência foi possível eliminar alguns candidatos como condições suficientes de adiabaticidade (8), tornando ele um filtro para as diferentes propostas como condição.

Portanto, para entender detalhadamente o procedimento de demonstração, permitamos ilustrar inicialmente com o caso da condição tradicional de adiabaticidade. Com esse objetivo,

façamos a hipótese que a condição seja satisfeita no sistema A , i.e.,

$$\left| \frac{\langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle}{E_m^A(t) - E_n^A(t)} \right| \ll 1,$$

e desse modo $|\Psi^A(t)\rangle = U^A(t)|E_n^A(0)\rangle \approx |\psi_{adi}^A(t)\rangle = e^{i\alpha_n^A(t)}|E_n^A(t)\rangle$ onde $\alpha_n^A = -\int_0^t dt' E_n^A(t') + i\int_0^t dt' \langle E_n^A(t') | \dot{E}_n^A(t') \rangle$, e

$$|\langle \psi_{adi}^A(t) | \psi^A(t) \rangle| = |\langle E_n^A(t) | U^A(t) | E_n^A(0) \rangle| \approx 1. \quad (5.1.15)$$

Então, se o valor de $\left| \frac{\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle}{E_m^B(t) - E_n^B(t)} \right|$ for $\ll 1$ a condição será consequentemente inconsistente. Dessa maneira, a partir da transformação (5.1.14) os autovalores e autovetores instantâneos de B se relacionam com os de A como,

$$E_n^B(t) = -E_n^A(t), \quad (5.1.16)$$

$$|E_n^B(t)\rangle = U^{A\dagger}(t)|E_n^A(t)\rangle, \quad (5.1.17)$$

e portanto,

$$\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle = iE_m^A(t)\delta_{mn} + \langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle, \quad (5.1.18)$$

o que implica que,

$$\left| \frac{\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle}{E_m^B(t) - E_n^B(t)} \right| = \left| \frac{\langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle}{E_m^A(t) - E_n^A(t)} \right| \ll 1, \quad m \neq n, \quad \forall t \in [0, t_f].$$

Isso quer dizer que o sistema B satisfaz a condição adiabática padrão se A satisfaz ela também. Logo, se B satisfaz a condição de adiabaticidade conduz à seguinte relação,

$$|\langle \psi_{adi}^B(t) | \psi^B(t) \rangle| = |\langle E_n^B(t) | U^B(t) | E_n^B(0) \rangle| \approx 1.$$

No entanto, analisando $|\langle \psi_{adi}^B(t) | \psi^B(t) \rangle|$, usando (5.1.17) tal que $|E_n^B(0)\rangle = |E_n^A(0)\rangle$ e o fato que $U^B = U^{A\dagger}$ vemos que,

$$\begin{aligned} |\langle \psi_{adi}^B(t) | \psi^B(t) \rangle| &= |\langle E_n^B(t) | U^B(t) | E_n^B(0) \rangle| \\ &= |\langle E_n^A(t) | U^A(t) U^{A\dagger}(t) | E_n^A(0) \rangle| \\ &= |\langle E_n^A(t) | E_n^A(0) \rangle| \approx 1 \end{aligned}$$

Portanto, só é possível uma dinâmica adiabática em B se,

$$|\langle E_n^A(t) | E_n^A(0) \rangle| \simeq 1,$$

sendo diferente ao resultado da hipótese encontrado em (5.1.15). Assim, essa condição não pode ser suficiente para garantir uma evolução adiabática.

Desta maneira, vamos verificar a consistência de nossa condição. Portanto, assumindo que ela é satisfeita no sistema A tal que,

$$\frac{|\langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle|^2}{\left| \frac{d}{dt} \left(\langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle e^{\gamma_{mn}^A} e^{-i\theta_{mn}^A} \right) \right|} \ll 1, \quad m \neq n, \quad (5.1.19)$$

e usando o fato que (5.1.18), temos que $\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle = \langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle$ quando $m \neq n$, e no caso $m = n$ conseguimos,

$$\begin{aligned} \gamma_{mn}^A &= \int_0^t dt' \left(\langle E_m^A(t') | \dot{E}_m^A(t') \rangle - \langle E_n^A(t') | \dot{E}_n^A(t') \rangle \right) \\ &= \int_0^t dt' \left(\langle E_m^B(t') | \dot{E}_m^B(t') \rangle - \langle E_m^A(t') | \dot{E}_n^A(t') \rangle \right) - i \int_0^t dt' (E_m^A(t') - E_n^A(t')) \\ &= \gamma_{mn}^B + i\theta_{mn}^A, \end{aligned}$$

posteriormente,

$$\langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle e^{\gamma_{mn}^A} e^{-i\theta_{mn}^A} = \langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle e^{\gamma_{mn}^B},$$

e por conseguinte, se é satisfeita a relação (5.1.19) obtemos que,

$$\frac{|\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle|^2}{\left| \frac{d}{dt} \left(\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle e^{\gamma_{mn}^B} \right) \right|} \ll 1, \quad m \neq n, \quad \forall t \in [0, t_f]. \quad (5.1.20)$$

Finalmente, se garantimos que (5.1.20) não implique na relação

$$\frac{|\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle|^2}{\left| \frac{d}{dt} \left(\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle e^{\gamma_{mn}^B} e^{-i\theta_{mn}^B} \right) \right|} \ll 1, \quad (5.1.21)$$

então podemos afirmar que nossa condição de adiabaticidade é livre de inconsistência. Portanto, com o intuito de demonstrar que (5.1.20) não conduz na obtenção de (5.1.21), permi-

tamos inicialmente simplificar a notação, definindo $B_{m,n} \equiv \langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle e^{\gamma_{mn}^B}$, tal que

$$\begin{aligned} \left| \frac{d}{dt} \left(B_{m,n} e^{-i\theta_{mn}^B} \right) \right| &= \left| \frac{d}{dt} (B_{m,n}) - i B_{m,n} \frac{d\theta_{mn}^B}{dt} \right| \\ &\geq \left| \frac{d}{dt} (B_{m,n}) \right| - |B_{m,n}| \left| \frac{d\theta_{mn}^B}{dt} \right|, \end{aligned}$$

onde vemos que $\left| \frac{d}{dt} \left(B_{m,n} e^{-i\theta_{mn}^B} \right) \right| + |B_{m,n}| \left| \frac{d}{dt} (\theta_{mn}^B) \right| \geq \left| \frac{d}{dt} (B_{m,n}) \right| \gg |B_{m,n}|^2$, tal que foi usada a relação (5.1.20) e desse modo

$$\left| \frac{d}{dt} \left(B_{m,n} e^{-i\theta_{mn}^B} \right) \right| \gg |B_{m,n}|^2 \left(1 - \frac{1}{|B_{m,n}|} \left| \frac{d\theta_{mn}^B}{dt} \right| \right),$$

de maneira que se $\left| \frac{\dot{\theta}_{mn}^B}{B_{m,n}} \right| \ll 1$ implica em obter a relação (5.1.21), i.e., $\left| \frac{d}{dt} \left(B_{m,n} e^{-i\theta_{mn}^B} \right) \right| \gg |B_{m,n}|^2$, mas perceba que a condição imposta é equivalente a,

$$\left| \frac{\dot{\theta}_{mn}^B}{B_{m,n}} \right| = \left| \frac{E_m^B - E_n^B}{\hbar \langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle} \right| = \left| \frac{E_m^A - E_n^A}{\hbar \langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle} \right| \ll 1,$$

dessa forma, obriga ao sistema A que,

$$\left| \frac{\hbar \langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle}{E_m^A - E_n^A} \right| \gg 1,$$

contudo esta relação não é concordante com a hipótese de que a evolução no sistema A é adiabática, fazendo assim que nossa condição seja consistente.

5.2 Sistemas de múltiplos níveis

Até esse momento foi feito um estudo de sistemas de dois níveis usando nossa condição de adiabaticidade, onde foi vista sua suficiência e consistência. Mas agora vamos realizar uma dedução matemática de uma condição para sistemas de múltiplos níveis realizando uma prova de consistência baseada nos argumentos de Sanders. Logo depois será discutido um sistema de 3 qubits e o caso de um Hamiltoniano para três níveis.

Nessa ordem de ideias, da seção anterior sabemos que a dinâmica de um estado quântico

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t) e^{-\int_0^t dt' \langle \phi_m(t) | \dot{\phi}_m(t) \rangle} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(t')} |\phi_m(t)\rangle.$$

é determinada pelo conjunto de equações diferenciais acopladas,

$$\dot{a}_m = - \sum_{n \neq m} a_n d_{n,m} e^{-\gamma_{nm}} e^{i\theta_{nm}},$$

tal que foram definidos os parâmetros $\gamma_{nm}(t) \equiv \int_0^t dt' (\langle \phi_n(t') | \dot{\phi}_n(t') \rangle - \langle \phi_m(t') | \dot{\phi}_m(t') \rangle)$, e $\theta_{nm}(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' (E_n(t') - E_m(t'))$. Logo, seguindo o mesmo procedimento que no caso de dois níveis, pode se reescrever esse conjunto de equações diferenciais de forma mais compacta como,

$$i \frac{d}{dt} \vec{a}(t) = h(t) \vec{a}(t), \quad (5.2.1)$$

onde foi acrescentado o número i convenientemente tal que as componentes da matriz $h(t)$ são,

$$h_{n,m}(t) = \begin{cases} 0, & n = m \\ -i d_{n,m} e^{-\gamma_{nm}} e^{i\theta_{nm}}, & n \neq m \end{cases}$$

e $h(t)$ é hermitiano pelo fato que $\gamma_{nm} = -\gamma_{mn}$, $\gamma_{nm} = -\gamma_{nm}^*$, $\theta_{nm} = -\theta_{mn} = \theta_{nm}^*$ e $d_{nm} = -d_{mn}^*$. Desse modo, para encontrar agora uma condição que imponha que $a_n(t) = a_n(0)$, deve se satisfazer que (equivalente a como foi feito para o caso de dois níveis),

$$\left\| \frac{dh}{dt} \right\| \gg \left\| h^2 \right\|, \quad (5.2.2)$$

onde $\|O\| = \sqrt{\lambda_{\max}(O^\dagger O)}$, vemos que,

$$i \frac{d^2 \vec{a}}{dt^2} = \frac{d}{dt} (h \vec{a}) \approx \frac{dh}{dt} \vec{a},$$

e portanto,

$$a_n(t) \approx \text{cte.}$$

Agora, continuando com o estudo permitamos realizar a demonstração de consistência segundo o critério de Sanders, tal que se temos um sistema A onde a condição de adiabaticidade $\left\| \frac{dh^A}{dt} \right\| \gg \left\| (h^A)^2 \right\|$ é satisfeita e definirmos um segundo sistema B com uma dinâmica

regida pela equação $i \frac{d}{dt} \vec{a}_B(t) = h^B(t) \vec{a}_B(t)$, onde

$$h_{n,m}^B(t) = \begin{cases} 0, & n = m \\ -i d_{n,m}^B e^{-\gamma_{nm}^B} e^{i\theta_{nm}^B}, & n \neq m \end{cases}$$

e além disso,

$$h^B(t) = -U^{A\dagger}(t) h^A(t) U^A(t),$$

de tal forma que, $d_{n,m}^B = d_{n,m}^A$, $\gamma_{nm}^B = \gamma_{nm}^A - i\theta_{nm}^A$ e $\theta_{nm}^B = -\theta_{nm}^A$ e assim,

$$h_{n,m}^B(t) = \begin{cases} 0, & n = m \\ h_{n,m}^A e^{-i\theta_{nm}^A} & n \neq m \end{cases}$$

tal que podemos escrever $h^B = u^{A\dagger} h^A u^A$, onde foi definida a matriz unitária $u^A(t) \equiv \sum_j e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_j^A(t')} |j\rangle \langle j|$ e $|j\rangle$ é a base canônica. Logo vemos claramente que $\|(h^A)^2\| = \|(h^B)^2\|$ e por outro lado,

$$\begin{aligned} \left\| \frac{dh^B}{dt} \right\| &= \left\| \frac{d(u^{A\dagger} h^A u^A)}{dt} \right\| \\ &= \left\| \frac{du^{A\dagger}}{dt} h^A u^A + u^{A\dagger} \frac{dh^A}{dt} u^A + u^{A\dagger} h^A \frac{du^A}{dt} \right\| \\ &= \left\| \frac{i}{\hbar} u^{A\dagger} \varepsilon h^A u^A + u^{A\dagger} \frac{dh^A}{dt} u^A - \frac{i}{\hbar} u^{A\dagger} h^A \varepsilon u^A \right\| \\ &= \left\| u^{A\dagger} \frac{dh^A}{dt} u^A + \frac{i}{\hbar} u^{A\dagger} [\varepsilon, h^A] u^A \right\| \\ &= \left\| u^{A\dagger} \left(\frac{dh^A}{dt} + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon, h^A] \right) u^A \right\| \\ &= \left\| \frac{dh^A}{dt} + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon, h^A] \right\| \end{aligned}$$

onde temos usado na terceira linha o fato que $i\hbar \frac{du^A(t)}{dt} = \sum_j E_j^A(t) |j\rangle \langle j| u^A(t) \equiv \varepsilon(t) u^A(t)$. Portanto,

$$\frac{\left\| \frac{dh^B}{dt} \right\|}{\|(h^B)^2\|} = \frac{\left\| \frac{dh^A}{dt} + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon, h^A] \right\|}{\|(h^A)^2\|},$$

como a norma de um operador satisfaz a desigualdade triangular $\left\| \frac{dh^A}{dt} + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon, h^A] \right\| \geq \left\| \frac{dh^A}{dt} \right\| -$

$\frac{1}{\hbar} \|\left[\varepsilon, h^A\right]\|$ obtemos,

$$\frac{\left\|\frac{dh^B}{dt}\right\|}{\|(h^B)^2\|} \geq \frac{\left\|\frac{dh^A}{dt}\right\| - \frac{1}{\hbar} \|\left[\varepsilon, h^A\right]\|}{\|(h^A)^2\|},$$

e por hipótese sabemos que $\frac{\left\|\frac{dh^A}{dt}\right\|}{\|(h^A)^2\|} \gg 1$, implicando que

$$\frac{\left\|\frac{dh^B}{dt}\right\|}{\|(h^B)^2\|} \gg 1 - \frac{\frac{1}{\hbar} \|\left[\varepsilon, h^A\right]\|}{\|(h^A)^2\|},$$

fazendo que nossa condição de adiabaticidade seja inconsistente somente se é satisfeita a relação,

$$\frac{\|\left[\varepsilon, h^A\right]\|}{\hbar \|(h^A)^2\|} \ll 1. \quad (5.2.3)$$

Contudo, observe que

$$\left[\varepsilon, h^A\right] = \sum_{n,m} (E_n^A - E_m^A) h_{nm}^A |n\rangle\langle m|,$$

de tal modo que a relação (5.2.3) tem a característica de

$$\frac{\|\left[\varepsilon, h^A\right]\|}{\hbar \|(h^A)^2\|} \ll 1 \implies \frac{(E_n^A - E_m^A)^2}{\hbar \langle \phi_m | \dot{H}^A | \phi_n \rangle} \ll 1.$$

Teríamos então que a taxa de variação do Hamiltoniano calculada para elementos conectando os autoestados de energia seria muito maior do que o gap ao quadrado. Este tipo de relação é conhecido a levar à quebra da adiabaticidade da evolução, deste modo violando a hipótese inicial. É claro que a argumentação apresentada não constitui uma prova rigorosa, de modo que não podemos considerar que realizamos uma demonstração formal da consistência da condição proposta nesta tese para o caso de sistemas de muito níveis. Contudo, no contexto físico, é muito plausível que de fato a condição será consistente, salvo em situações muito peculiares. Este é um ponto que merecerá futuras investigações para ou se obter uma prova formal ou coletar evidências suficientes para dar robustez à conclusão alcançada.

Para finalizar com a análise de sistemas de muitos níveis, se desejarmos caracterizar a adiabaticidade desse tipo de sistemas a partir das condições C_i definidas em (5.0.3), (5.0.4), (5.0.5), (5.0.6) e (5.1.13) considerando apenas os dois estados mais baixos de energia, pode nos levar a uma caracterização da dinâmica errônea, pois o fato de somente nos focar nesses

dois estados faz que desprezemos as possíveis excitações do sistema a estados superiores. Por exemplo, o sistema pode migrar para o segundo estado excitado mesmo tendo uma condição de adiabaticidade indicando que o sistema é adiabático, pois somente foi analisado a possível excitação ao primeiro estado excitado, dando dessa maneira uma informação errada.

Em virtude disso, para deixar mais claro a continuação vamos analisar as condições C_1 , C_2 , C_3 , C_4 e C_p num sistema de 3 qubits regido pelo Hamiltoniano,

$$\begin{aligned} H(t) &= A(t)H_0 + B(t)H_P, \\ H_0 &= -\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} \sigma_x^{(i)}, \\ H_P &= \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)} + \sum_{i=1}^{N-1} J_{i,i+1} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)}, \end{aligned}$$

onde $A(t) = \hbar\epsilon_0(1 + \cos(\alpha_3 t))$, $B(t) = \hbar\epsilon_0(1 - \cos(\alpha_3 t))$, $\alpha_3 t_f = \pi$, $\epsilon_0/2\pi = 318.3\text{MHz}$ e o campo transversal λ_i é desordenado, tal que esse sistema foi analisado em detalhe no Capítulo 4. Então, nessa ordem de ideias foi calculado o valor máximo de cada quantificador durante toda a evolução, estimando somente o par formado pelo estado fundamental e o primeiro excitado para um ensemble de 1024 realizações associados às flutuações de 10% em λ_i , cujo máximo de cada condição foi comparado com seu valor máximo ideal, i.e., quando λ_i não varia (realização ideal). Assim, para cada valor da condição de adiabaticidade relativa C_i/C_i^{ideal} foi relacionado um valor da probabilidade de sucesso como é observado na Fig. (5.2.1).

Antes de obter os resultados mostrados na Fig. 5.2.1 nós esperávamos que se cada C_i $i \in \{1, 2, 3, 4, p\}$ fosse consistente para esse problema, o comportamento da probabilidade de sucesso deveria decrescer monotonicamente à medida que C_i aumenta. No entanto, esse comportamento que era esperado ocorrer não aparece nesse sistema de estudo para nenhuma das condições como são vistos nos painéis (a-e) da Fig. 5.2.1. Desse modo, para C_1, C_2, C_3 e C_p , os resultados revelam que não existe um regime onde as condições possam ser consideradas como quantificadoras de adiabaticidade, pois a redução de C_i não implica necessariamente no aumento da probabilidade de sucesso. Também, no que se refere à condição C_4 , encontramos que ela chega ser uma quantidade mais confiável quando seu valor se reduz, mas esse comportamento somente acontece perto do valor de saturação, i.e., $P_S = 1$.

Em vista disso, encontraríamos que nenhuma condição resulta ser confiável para caracterizar a adiabaticidade desse sistema, mas como já tínhamos antecipado, o fato de possuir muitos níveis (tal que neste sistema temos 2^3 níveis) e usar uma condição que compara somente os dois estados mais baixos de energia era possível que esse comportamento se desse. Portanto, se por exemplo calcularmos a condição C_1 entre o estado fundamental e o primeiro

Figura 5.2.1 – Probabilidade de sucesso como uma função das condições de adiabaticidade C_i , considerando-se apenas os dois primeiros níveis, definidos em (5.0.3), (5.0.4), (5.0.5), (5.0.6) e (5.1.13) calculados para cada conjunto de 1024 realizações quando λ_i é desordenado cujas flutuações estão associadas a um desvio padrão de 10% para um sistema de 3 qubits. O C_i^{ideal} denota o valor máximo da figura de mérito para a realização ideal. As linhas tracejadas indicam os valores relacionados à realização ideal.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 5.2.2 – Análise da adiabaticidade do sistema de 3 qubits fabricados no estado fundamental a partir do comportamento da condição de adiabaticidade $C_1(t)$ quando são considerados os efeitos a estados superiores. Nesse caso foram calculados para o primeiro e segundo estado excitado: C_1^{01} (preto) e C_1^{02} (vermelho) respectivamente, tal que para uma realização particular com λ_i flutuando com 10% de desvio padrão foi encontrado que $C_1^{02} \geq C_1^{01}$ fazendo desse modo que uma análise à quantidade C_1^{01} não seja adequada para caracterizar a dinâmica adiabática do sistema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

excitado, e o estado fundamental com o segundo excitado observamos a partir da Fig. (5.2.2) que C_1^{01} é menor que C_1^{02} quando é escolhida uma realização particular do conjunto de 1024, fazendo assim que seja evidente a razão pela qual as condições não foram consistentes para esse problema.

Perceba-se que para esse sistema o gap mínimo encontrasse em $s_{min} \approx 0.09$, i.e. praticamente no início do protocolo e além disso sabemos que o primeiro estado excitado em $t = 0$ tem uma degenerescência de 8 (ver Fig. 2.1.2) fazendo necessário não somente nos focar no primeiro estado excitado pois os estados superiores são relevantes ao tentar quantificar a adiabaticidade do sistema.

Em virtude desse tipo de característica pretendemos analisar a dinâmica de sistemas que iniciam sua evolução no estado fundamental e possuem excitações a estados superiores ($n \geq 2$) com o objetivo de ver como nosso quantificador C_p se comporta nessa situação, tal que motivados por isto construímos um Hamiltoniano da seguinte forma,

$$H(t) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \Delta_i (|i\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle i|) - \frac{t}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \Gamma_i |i\rangle\langle i| + |0\rangle\langle 0|, \quad (5.2.4)$$

onde Δ_i e Γ_i são dois parâmetros de controle com o fim de manipular a dinâmica de excitações e $|i\rangle$ é a base de $\sigma_z^{(i)}$. Logo, dependendo dos valores que são atribuídos aos parâmetros Δ_i e Γ_i

Figura 5.2.3 – (a) Evolução da probabilidade de sucesso para manter o sistema no estado fundamental o qual é determinado pelo Hamiltoniano de três níveis (5.2.4). (b) Se é induzido que o sistema tenha uma maior probabilidade de popular o segundo estado excitado que o primeiro, encontramos que a condição C_p^{02} é muito maior que C_p^{01} , e relacionando a queda de probabilidade ao valor de C_p^{02} . É evidente que se tivéssemos analisado o valor de C_p^{01} o qual é $\ll 1$ deveríamos encontrar uma dinâmica praticamente adiabática, nos dando uma caracterização errada da dinâmica do sistema. Foram usados os valores de $\Delta_1 = 1/20$, $\Delta_2 = 3$, $\Gamma_0 = 10$, $\Gamma_1/\Gamma_0 = -0.5$ e $\Gamma_2/\Gamma_0 = -1.5$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

podem existir excitações do estado fundamental a estados superiores, fazendo necessário que o quantificador de adiabaticidade seja calculado para todas as possíveis excitações pois somente estudando o caso no qual o sistema atinge o primeiro estado excitado não será suficiente para caracterizar a dinâmica. Por conseguinte, se por exemplo na dinâmica favorecemos a excitação do estado fundamental ao segundo excitado então qualquer perda de fidelidade será associada prioritariamente à transição a esse estado favorecido. Logo, calculando a condição C_p^{0m} tanto para o primeiro estado excitado como para o segundo ($m = 1$ e 2 respectivamente) encontramos que C_p^{02} é efetivamente maior que C_p^{01} como é visto na Fig. 5.2.3.b, cujo resultado era esperado por causa que a perda de adiabaticidade é causada pela transição ao segundo estado excitado.

A partir disso obtemos duas coisas realmente importantes. A primeira é que consistentemente o quantificador C_p^{02} representa uma condição suficiente de adiabaticidade para esse sistema, pois existe uma relação direta entre a probabilidade de sucesso com ela como aparece na Fig. 5.2.3.b. E segundo, se tivéssemos analisado somente o valor de C_p^{01} o qual foi $\ll 1$ ele estaria nos indicando a existência de uma dinâmica adiabática, mas nesse exemplo vemos que existe um alta perda de fidelidade, representando assim numa caracterização incorreta da dinâmica.

Portanto, podemos a partir dessa análises e inspirados pelo resultado obtido em (5.2.2),

$$\left\| \frac{dh}{dt} \right\| \gg \left\| h^2 \right\|,$$

conjeturar que no caso de múltiplos níveis a condição de adiabaticidade para manter um sistema no estado fundamental deveria ser,

$$\max_m \{C_p^{0m}\} = \max_m \left\{ \frac{|d_{0m}|^2}{\left| \frac{d}{dt} (d_{0m} e^{-\gamma_{0m}} e^{i\theta_{0m}}) \right|} \right\} \ll 1,$$

i.e., se é encontrando o m -ésimo estado, o qual tem a maior probabilidade de ser ocupado e garantido que C_p^{0m} seja muito menor que 1, dessa maneira poderia se manter uma dinâmica adiabática no sistema.

Capítulo 6

Conclusões

Nessa tese nós temos examinado simulações numéricas para investigar o desempenho de um processador quântico adiabático calculando a probabilidade média para alcançar um estado ideal final considerando erros de fabricação dos dispositivos que compõem o processador. Devemos enfatizar que apesar que neste estudo foi feito um enfoque maior no uso de qubits de fluxo supercondutores como recursos físicos, os resultados que foram obtidos podem ser aplicados para qualquer tipo de implementação física que consiga simular controladamente os Hamiltonianos $H_0 = -\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} \sigma_x^{(i)}$ e $H_P = \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)} + \sum_{i=1}^{N-1} J_{i,i+1} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)}$.

Desse modo, com o desenvolvimento deste estudo foi possível encontrar assinaturas para identificar as principais fontes da perda de fidelidade, tal que entre esses causantes estão aqueles que são associados aos erros estáticos determinados pelas flutuações que tem os parâmetros de H_P , tal que para os casos estudados aqui eles tinham uma sutil influência na perda de sucesso. No entanto, os erros dinâmicos gerados durante a evolução exibiram relevância numa fração dos problemas analisados, mostrando assim que os efeitos dinâmicos têm um papel determinante na fidelidade, de modo que para obter alto sucesso na computação é requerido um grande esforço para garantir reduzir tantos os efeitos estáticos como os dinâmicos.

Outro elemento que conduziria em obter perda de fidelidade é a posição na qual aparece o gap mínimo do sistema, tal que essa característica nos motivou a propor uma estratégia para reduzir a perda de sucesso, a qual consiste em manipular o Hamiltoniano inicial para deslocar a posição do gap mínimo para a região onde a dinâmica do sistema é caracterizada principalmente pelos parâmetros cujas flutuações conseguem ser mais controladas. Também cabe ressaltar que na estratégia que foi mostrada apesar que o tamanho do gap mínimo foi reduzido, à medida que ele era levado para a região onde o ruído tinha uma menor influência, o sucesso da computação aumentou. Portanto, esse método poderia ser usado para conseguir obter com alta fidelidade a solução de um problema a partir do uso de um processador quântico

adiabático.

Em vista dos resultados apresentados nesta tese, seria de grande interesse continuar com a exploração do comportamento da fidelidade quando o sistema tem um número maior de qubits. Esta pesquisa sobre os efeitos da escalabilidade, permitiria nos mostrar se efetivamente o impacto dos erros de fabricação sobre a probabilidade de sucesso expostos aqui continuam válidos, além da estratégia sugerida para minimizar a degradação da fidelidade do protocolo.

Outra perspectiva de uma futura investigação, é implementar o análise usado aqui a sistemas cujo gap mínimo apresentem uma redução exponencial à medida que o tamanho do sistema aumenta, i.e., estudar como os ruídos estáticos afetariam a sistemas com essa característica, tal que devemos notar que nesta tese quando foi estudado uma cadeia de qubits de tamanho variável ela não apresentava uma diminuição exponencial do gap mínimo.

Em virtude de analisar sistemas com características especiais, será explorado futuramente como os sistemas com frustração respondem frente às flutuações estáticas, tal que esse tipo de estudo poderia encaminhar a implicações significativas para estabelecer novos tipos de estratégias para reduzir os efeitos nocivos das imperfeições dos dispositivos físicos sobre o sucesso da computação.

Por outro lado, também foi feita uma discussão ao redor dos critérios de adiabaticidade e a dificuldade que existe para encontrar uma condição universal, tal que nós fomos inspirados a propor uma nova condição a qual consegue caracterizar diversos sistemas, entre eles aqueles que apresentam ressonância, tal que diversos critérios se mostraram não ser válidos para esse tipo especial de sistemas, e conseguimos verificar que nossa condição é suficiente e a partir de uma demonstração da sua consistência, implicando assim a pensar que ela pode ser uma excelente candidata para uma condição universal de adiabaticidade.

Para a condição que nós propusemos é fundamental realizar uma demonstração de necessidade e/ou uma prova mais rigorosa da sua consistência para assim ter total confiança de seu desempenho como critério de adiabaticidade, contudo aqui nós mostramos várias evidencias que indicam um caminho para verificar ser uma condição necessária.

Referências

- 1 KADOWAKI, T.; NISHIMORI, H. Quantum annealing in the transverse ising model. *Physical Review B*, v. 58, n. 5, p. 5355–5363, 1998.
- 2 SANTORO, G. E. et al. Theory of quantum annealing of an ising spin glass. *Science*, v. 295, n. 5564, p. 2427–2430, 2002.
- 3 BARAHONA, F. On the computational complexity of ising spin glass models. *Journal of Physics A*, v. 15, n. 10, p. 3241, 1982.
- 4 FARHI, E. et al. Quantum computation by adiabatic evolution. 2000. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0001106.pdf>>. Acesso em: 18 dez. 2017.
- 5 FARHI, E. et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem. *Science*, v. 292, n. 5516, p. 472, 2001.
- 6 KATO, T. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 5, n. 6, p. 435–439, 1950.
- 7 AMIN, M. H. S. Consistency of the adiabatic theorem. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 22, p. 220401, 2009.
- 8 TONG, D. M. et al. Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation. *Physical Review Letters*, v. 95, n. 11, p. 110407, 2005.
- 9 AMBAINIS, A.; REGEV, O. An elementary proof of the quantum adiabatic theorem. 2006. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0411152.pdf>>. Acesso em: 18 dez. 2017.
- 10 TONG, D. M. et al. Sufficiency criterion for the validity of the adiabatic approximation. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 15, p. 150402, 2007.
- 11 WU, J.-d. et al. Adiabatic condition and quantum geometric potential. *Physical Review A*, v. 77, n. 6, p. 062114, 2008.
- 12 DU, J. et al. Experimental study of the validity of quantitative conditions in the quantum adiabatic theorem. *Physical Review Letters*, v. 101, n. 6, p. 060403, 2008.
- 13 STEFFEN, M. et al. Experimental implementation of an adiabatic quantum optimization algorithm. *Physical Review Letters*, v. 90, n. 6, p. 067903, 2003.

- 14 PENG, X. et al. Quantum adiabatic algorithm for factorization and its experimental implementation. *Physical Review Letters*, v. 101, n. 22, p. 220405, 2008.
- 15 XU, N. et al. Quantum factorization of 143 on a dipolar-coupling nuclear magnetic resonance system. *Physical Review Letters*, v. 108, n. 13, p. 130501, 2012. Erratum: *Physical Review Letters*, v. 109, n. 26, p. 269902, 2012.
- 16 KEATING, T. et al. Adiabatic quantum computation with rydberg-dressed atoms. *Physical Review A*, v. 87, n. 5, p. 052314, 2013.
- 17 PLOEG, S. H. W. van der et al. Adiabatic quantum computation with flux qubits, first experimental results. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, v. 17, n. 2, p. 113–119, 2007.
- 18 JOHNSON, M. W. et al. Quantum annealing with manufactured spins. *Nature*, v. 473, p. 194. 2011. doi: 10.1038/nature10012.
- 19 LEWIS, H. R.; PAPADIMITRIOU, C. H. The efficiency of algorithms. *Scientific American*, v. 238, n. 1, p. 96–109, 1978.
- 20 MCGEOCH, C. C. Adiabatic quantum computation and quantum annealing: theory and practice. Williston: Morgan & Claypool, 2014.
- 21 SHOR, P. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: ANNUAL SYMPOSIUM ON FUNDAMENTALS OF COMPUTER SCIENCE, 35., 1994. Los Alamitos. *Proceedings...* Los Alamitos: IEEE Press, 1994. p. 124-134.
- 22 BOORMAN, S. A. Combinatorial optimization model for transmission of job information through contact networks. *Bell Journal of Economics*, v. 6, n. 1, p. 216, 1975.
- 23 UNGER, R.; MOULT, J. Finding the lowest free energy conformation of a protein is an np-hard problem: proof and implications. *Bulletin of Mathematical Biology*, v. 55, n. 6, p. 1183, 1993.
- 24 LAWLER, E. L. et al. The traveling salesman problem: a guided tour of combinatorial optimization. New York: John Wiley, 1995. (Wiley-Interscience series in discrete mathematics).
- 25 CHEN, X.; TOMPA, M. Comparative assessment of methods for aligning multiple genome sequences. *Nature Biotechnology*, v. 28, n. 6, p. 567, 2010.
- 26 HELD, M.; KARP, R. M. A dynamic programming approach to sequencing problems. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, v. 10, n. 1, p. 196, 1962.
- 27 HART, W. E.; ISTRAIL, S. Robust proofs of np-hardness for protein folding: General lattices and energy potentials. *Journal of Computational Biology*, v. 4, n. 1, p. 1, 1997.
- 28 BERGER, B.; LEIGHTON, T. Protein folding in the hydrophobic-hydrophilic (hp) model is np-complete. *Journal of Computational Biology*, v. 5, n. 1, p. 27, 1998.

- 29 CRESCENZI, P. et al. On the complexity of protein folding. *Journal of Computational Biology*, v. 5, n. 3, p. 597, 1998.
- 30 RADFORD, S. E. Protein folding: progress made and promises ahead. *Trends in Biochemical Sciences*, v. 25, n. 12, p. 611, 2000.
- 31 AVIS, D.; HERTZ, A.; MARCOTTE, O. (Ed.). *Graph theory and combinatorial optimization*. Amsterdam: Springer Science + Business Media, 2005.
- 32 LOOI, C.-K. Neural network methods in combinatorial optimization. *Computers & Operations Research*, v. 19, n. 3-4, p. 191–208, 1992.
- 33 KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. *Science*, v. 220, n. 4598, p. 671, 1983.
- 34 FARHI, E.; GOLDSTONE, J.; GUTMANN, S. Quantum adiabatic evolution algorithms versus simulated annealing. 2002. Disponível em: < <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0201031.pdf> >. Acesso em: 18 dez. 2017.
- 35 BATTAGLIA, D. A.; SANTORO, G. E.; TOSATTI, E. Optimization by quantum annealing: lessons from hard satisfiability problems. *Physical Review E*, v. 71, n. 6, p. 066707, 2005.
- 36 DENCHEV, V. S. et al. What is the computational value of finite-range tunneling? *Physical Review X*, v. 6, n. 3, p. 031015, 2016.
- 37 GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v. 5, n. 6, p. 721, 1984.
- 38 DAS, A.; CHAKRABARTI, B. K. Colloquium: quantum annealing and analog quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, v. 80, n. 3, p. 1061, 2008.
- 39 BOROS, E.; HAMMER, P. L. Pseudo-boolean optimization. *Discrete Applied Mathematics*, v. 123, n. 1, p. 155–225, 2002.
- 40 HARRIS, R. et al. Implementation of a quantum annealing algorithm using a superconducting circuit. 2009. Disponível em: < <https://arxiv.org/pdf/0903.3906.pdf> >. Acesso em: 18 dez. 2017.
- 41 RAJAK, A.; CHAKRABARTI, B. K. Quantum annealing search of ising spin glass ground state(s) with tunable transverse and longitudinal fields. *Indian Journal of Physics*, v. 88, n. 9, p. 951, 2014.
- 42 BORN, M.; FOCK, V. A. Beweis des adiabatenatzes. *Zeitschrift für Physik*, v. 51, n. 3-4, p. 165–180, 1928.
- 43 SARANDY, M.; WU, L.-A.; LIDAR, D. Consistency of the adiabatic theorem. *Quantum Information Processing*, v. 3, p. 331, 2004.

- 44 RIGOLIN, G.; ORTIZ, G. Adiabatic perturbation theory and geometric phases for degenerate systems. *Physical Review Letters*, v. 104, n. 17, p. 170406, 2010.
- 45 AMIN, M. H. S.; LOVE, P. J.; TRUNCIK, C. J. S. Thermally assisted adiabatic quantum computation. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 6, p. 060503, 2008.
- 46 AHARONOV, D. et al. Adiabatic quantum computation is equivalent to standard quantum computation. *SIAM Journal of Computing*, v. 37, n. 1, p. 166–194, 2007.
- 47 MIZEL, A.; LIDAR, D. A.; MITCHELL, M. Simple proof of equivalence between adiabatic quantum computation and the circuit model. *Physical Review Letters*, v. 99, n. 7, p. 070502, 2007.
- 48 SCHALLER, G.; MOSTAME, S.; SCHÜTZHOLD, R. General error estimate for adiabatic quantum computing. *Physical Review A*, v. 73, n. 6, p. 062307, 2006.
- 49 JÖRG, T. et al. Simple glass models and their quantum annealing. *Physical Review Letters*, v. 101, n. 14, p. 147204, 2008.
- 50 HEN, I.; YOUNG, A. P. Exponential complexity of the quantum adiabatic algorithm for certain satisfiability problems. *Physical Review E*, v. 84, n. 6, p. 061152, 2011.
- 51 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 52 LANDAU, L. D. Zur theorie der energieübertragung. ii. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, v. 2, p. 46, 1932.
- 53 ZENER, C. Non-adiabatic crossing of energy levels. *Proceedings of the Royal Society of London A: mathematical, physical and engineering sciences*, v. 137, n. 833, p. 696–702, 1932.
- 54 FRIEDMAN, J. R. et al. Quantum superposition of distinct macroscopic states. *Nature*, v. 406, p. 43. 2000. doi: 10.1038/35017505.
- 55 HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. *Reviews of Modern Physics*, v. 81, n. 2, p. 865–942, 2009.
- 56 BERKLEY, A. J. et al. Entangled macroscopic quantum states in two superconducting qubits. *Science*, v. 300, n. 5625, p. 1548–1550, 2003.
- 57 SMIRNOV, A. Y.; AMIN, M. H. Ground-state entanglement in coupled qubits. *Physical Review A*, v. 88, n. 2, p. 022329, 2013.
- 58 LEGGETT, A. J. et al. Dynamics of the dissipative two-state system. *Reviews of Modern Physics*, v. 59, n. 1, p. 1, 1987.
- 59 KAMINSKY, W. M.; LLOYD, S.; ORLANDO, T. P. *Scalable superconducting architecture for adiabatic quantum computation*. 2004. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0403090.pdf>>. Acesso em: 18 dez. 2017.

- 60 GRAJCAR, M.; IZMALKOV, A.; IL'ICHEV, E. Possible implementation of adiabatic quantum algorithm with superconducting flux qubits. *Physical Review B*, v. 71, p. 144501, 2005.
- 61 GRAJCAR, M. et al. Direct josephson coupling between superconducting flux qubits. *Physical Review B*, v. 72, n. 2, p. 020503, 2005.
- 62 GRAJCAR, M. et al. Four-qubit device with mixed couplings. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 4, p. 047006, 2006.
- 63 HARRIS, R. et al. Experimental investigation of an eight-qubit unit cell in a superconducting optimization processor. *Physical Review B*, v. 82, n. 2, p. 024511, 2010.
- 64 BOIXO, S. et al. Evidence for quantum annealing with more than one hundred qubits. *Nature Physics*, v. 10, p. 218. 2014. doi: 10.1038/nphys2900.
- 65 GIBNEY, E. D-wave upgrade: How scientists are using the world's most controversial quantum computer. *Nature*, v. 541, n. 7638, p. 447, 2017.
- 66 PERDOMO-ORTIZ, A. et al. Finding low-energy conformations of lattice protein models by quantum annealing. *Scientific Reports*, v. 2, p. 571. 2012. doi: 10.1038/srep00571.
- 67 BIAMONTE, J. et al. Quantum machine learning. *Nature*, v. 549, p. 195. 2017. doi: 10.1038/nature23474.
- 68 MOTT, A. et al. Solving a higgs optimization problem with quantum annealing for machine learning. *Nature*, v. 550, n. 7676, p. 375, 2017.
- 69 BIAN, Z. et al. Experimental determination of ramsey numbers. *Physical Review Letters*, v. 111, n. 13, p. 130505, 2013.
- 70 O'MALLEY, D. et al. *Nonnegative/binary matrix factorization with a d-wave quantum annealer*. 2017. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/1704.01605.pdf>>. Acesso em: 18 dez. 2017.
- 71 USHIJIMA-MWESIGWA, H.; NEGRE, C. F. A.; MNISZEWSKI, S. M. *Graph partitioning using quantum annealing on the d-wave system*. 2017. Disponível em: <<https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1705/1705.03082.pdf>>. Acesso em 18 dez. 2017.
- 72 NEUKART, F. et al. 2017. *Traffic flow optimization using a quantum annealer*. 2017. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/1708.01625.pdf>>. Acesso em: 18 dez. 2017.
- 73 MAKHLIN, Y.; SCHÖN, G.; SHNIRMAN, A. Quantum-state engineering with josephson-junction devices. *Reviews of Modern Physics*, v. 73, n. 2, p. 357–400, 2001.
- 74 LONDON, F. *Superfluids*. New York: Wiley, 1950.
- 75 JOSEPHSON, B. Possible new effects in superconductive tunnelling. *Physics Letters*, v. 1, n. 7, p. 251–253, 1962.

- 76 JOSEPHSON, B. D. The discovery of tunnelling supercurrents. *Reviews of Modern Physics*, v. 46, n. 2, p. 251–254, 1974.
- 77 CALDEIRA, A. O. *An introduction to macroscopic quantum phenomena and quantum dissipation*. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- 78 YOU, J. Q.; NORI, F. Superconducting circuits and quantum information. *Physics Today*, v. 58, n. 11, p. 42–47, 2005.
- 79 FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. *The Feynman lectures on physics*. Reading, Mass: Addison-Wesley Publishing Company, 1965.
- 80 LIKHAREV, K. Superconducting weak links. *Reviews of Modern Physics*, v. 51, n. 1, p. 101, 1979.
- 81 CLARKE, J.; WILHELM, F. K. Superconducting quantum bits. *Nature*, v. 453, p. 1031–1042. 2008. doi: 10.1038/nature07128.
- 82 LIKHAREV, K. K. *Dynamics of Josephson junctions and circuits*. New York: Gordon and Breach Science Publishers, 1986.
- 83 SIDDIQI, I. et al. Dispersive measurements of superconducting qubit coherence with a fast latching readout. *Physical Review B*, v. 73, n. 5, p. 054510, 2006.
- 84 YOU, J. Q. et al. Low-decoherence flux qubit. *Physical Review B*, v. 75, n. 14, p. 140515 (R), 2007.
- 85 KOCH, J. et al. Charge-insensitive qubit design derived from the cooper pair box. *Physical Review A*, v. 76, n. 4, p. 042319, 2007.
- 86 MANUCHARYAN, V. et al. Fluxonium: Single cooper-pair circuit free of charge offsets. *Science*, v. 326, n. 5949, p. 113, 2009.
- 87 BARENDT, R. et al. Coherent josephson qubit suitable for scalable quantum integrated circuits. *Physical Review Letters*, v. 111, n. 8, p. 080502, 2013.
- 88 TINKHAM, M. *Introduction to superconductivity*. New York: McGraw-Hill, Inc., 1996.
- 89 HARRIS, R. et al. Experimental demonstration of a robust and scalable flux qubit. *Physical Review B*, v. 81, n. 13, p. 134510, 2010.
- 90 BURKARD, G.; KOCH, R. H.; DIVINCENZO, D. P. Multilevel quantum description of decoherence in superconducting qubits. *Physical Review B*, v. 69, n. 6, p. 064503, 2004.
- 91 BRINK, A. M. van den; BERKLEY, A. J.; YALOWSKY, M. Mediated tunable coupling of flux qubits. *New Journal of Physics*, v. 7, p. 1. 2005. doi:10.1088/1367-2630/7/1/230.
- 92 HARRIS, R. et al. Compound josephson-junction coupler for flux qubits with minimal crosstalk. *Physical Review B*, v. 80, n. 5, p. 052506, 2009.

- 93 DEVORET, M. H.; MARTINIS, J. M. Implementing qubits with superconducting integrated circuits. *Quantum Information Processing*, v. 3, n. 1-5, 2004.
- 94 HARRIS, R. et al. Synchronization of multiple coupled rf-squid flux qubits. *New Journal of Physics*, v. 11, n. 12, p. 123022, 2009.
- 95 ZHU, Z. et al. Best-case performance of quantum annealers on native spin-glass benchmarks: How chaos can affect success probabilities. *Physical Review A*, v. 93, n. 1, p. 012317, 2016.
- 96 VARGAS-G., J. A.; BRITO, F. On the adiabatic quantum dynamics of fabricated ising chains. 2017. Disponível em: < <https://arxiv.org/pdf/1706.07452.pdf> >. Acesso em: 15 nov. 2017.
- 97 ALBASH, T.; LIDAR, D. A. Adiabatic quantum computation. *Review of Modern Physics*, v. 90, n. 1, p. 015002, 2018.
- 98 MARZLIN, K.-P.; SANDERS, B. C. Inconsistency in the application of the adiabatic theorem. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 16, p. 160408, 2004.
- 99 SARANDY, M. S.; LIDAR, D. A. Adiabatic approximation in open quantum systems. *Physical Review A*, v. 71, n. 1, p. 012331, 2005.
- 100 ALBASH, T.; LIDAR, D. A. Decoherence in adiabatic quantum computation. *Physical Review A*, v. 91, n. 6, p. 062320, 2015.
- 101 VENUTI, L. C. et al. Adiabaticity in open quantum systems. *Physical Review A*, v. 93, n. 3, p. 032118, 2016.
- 102 WU, J. et al. Adiabatic approximation condition. 2007. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/0706.0264.pdf>>. Acesso em: 23 dez. 2017.
- 103 VARGAS-G., J. A.; BRITO, F. 2018. (Em preparação).
- 104 JAMES, D. F. V.; JERKE, J. Effective hamiltonian theory and its applications in quantum information. *Canadian Journal of Physics*, v. 85, n. 6, p. 625, 2007.
- 105 KHANDEKAR, D. C.; LAWANDE, S. V. Exact propagator for a time-dependent harmonic oscillator with and without a singular perturbation. *Journal of Mathematical Physics*, v. 16, n. 2, p. 384, 1975.

Apêndice A

Oscilador Harmônico com frequência dependente do tempo

O Hamiltoniano para um oscilador harmônico com frequência dependente do tempo é dado por

$$H(t) = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2(t) X^2}{2}.$$

Assumiremos uma dependência linear de $\omega(t)$ com o tempo, i.e., $\omega(t) = \omega_0 + \theta t$, tal que ω varia muito lentamente. Nosso objetivo será determinar a condição que permita manter o sistema com uma probabilidade próxima de 1 no estado fundamental ao final da evolução, escolhendo como condição inicial o estado fundamental $|\Psi(t')\rangle = |\phi_g(t')\rangle$.

Nós vamos descrever a dinâmica do sistema usando o formalismo de integrais de trajetória empregando os resultados de (105), tal que se temos a condição inicial $\psi(x', t') \equiv \langle x' | \phi_g(t') \rangle$ o estado evoluído seria,

$$\tilde{\psi}(x'', t'') = \int dx' K(x'', t''; x', t') \psi(x', t'),$$

onde K é denominado o propagador e é definido por uma integral de trajetória, que depois de um minucioso cálculo consegue-se escrever como,

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{a_N/2\pi} \exp(ip_N x'^2 + iq_N x''^2) \exp(-ia_N x'' x'), \quad (\text{A.0.1})$$

onde

$$a_N \rightarrow \frac{\hbar}{m} \left(\frac{\dot{Q}(t')}{Q(t'')} \right), \quad (\text{A.0.2})$$

$$q_N \rightarrow \frac{m}{2\hbar} \frac{\dot{Q}(t'')}{Q(t'')}, \quad (\text{A.0.3})$$

$$p_N \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon^2} \int_{t'+\epsilon}^{t''} dt \frac{Q^2(t'+\epsilon)}{Q^2(t)} \right). \quad (\text{A.0.4})$$

((A.0.4) representa o resultado corrigido daquele mostrado em (105) o qual está erradamente escrito: $p_N \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{m}{2\hbar} \left(1 - \epsilon \int_{t'+\epsilon}^{t''} dt \frac{Q^2(t')}{Q^2(t)} \right)$), tal que a função $Q(t)$ satisfaz a equação diferencial $\ddot{Q}(t) = -\frac{\omega^2(t)}{2}Q(t)$, com condição inicial $Q_0 \equiv Q(t') = 0$. Agora, considerando o caso com dependência linear no tempo, i.e., $\omega(t) = \omega_0 + \theta t$, a solução de esta equação diferencial é,

$$Q(t) = Q_0 \left\{ D_{-\frac{1}{2}}(f(t')) D_{-\frac{1}{2}}(if(t)) - D_{-\frac{1}{2}}(if(t')) D_{-\frac{1}{2}}(f(t)) \right\},$$

onde $f(t) = (-1)^{1/4} \sqrt{\frac{2}{\theta}} (\omega_0 + \theta t)$ e $D_{-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{z}{2\pi}} K_{\frac{1}{4}}(\frac{1}{4}z^2)$, tal que $K_{\frac{1}{4}}$ é uma função de Bessel modificada de segunda ordem. É possível escrever $D_{-\frac{1}{2}}(z)$ em termos das funções de Bessel de primeira ordem como,

$$D_{-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{z}{2\pi}} K_{\frac{1}{4}}(\frac{1}{4}z^2) = \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\frac{1}{4}}(z) - I_{\frac{1}{4}}(z)}{\sin(\frac{1}{4}\pi)},$$

e fazendo uma expansão em z^{-1} , conseguimos

$$K_\nu(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left\{ 1 + \frac{\mu-1}{8z} + \frac{(\mu-1)(\mu-9)}{2!(8z)^2} + \frac{(\mu-1)(\mu-9)(\mu-25)}{3!(8z)^3} + \dots \right\},$$

$$\left(|\arg z| < \frac{3}{2}\pi \right),$$

onde $\mu \equiv 4\nu^2$. Considerando z muito grande (equivalente a θ muito pequeno) obtemos

$$K_\nu(z) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z},$$

portanto nesse limite,

$$D_{-\frac{1}{2}}(z) \simeq \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{2\frac{1}{4}z^2}} e^{-\frac{1}{4}z^2} = \frac{e^{-\frac{1}{4}z^2}}{\sqrt{z}}$$

Logo,

$$\begin{aligned} Q(t) &= \frac{Q_0}{\sqrt{if(t)f(t')}} \sinh \left[\frac{f(t)^2 - f(t')^2}{4} \right] = \frac{\tilde{Q}_0}{\sqrt{\dot{\gamma}(t)}} \sin[\gamma(t) - \gamma(t')] \\ &\equiv s(t) \sin[\gamma(t) - \gamma(t')] \end{aligned}$$

onde temos definido $\gamma(t) = \frac{(\omega_0 + \theta t)^2}{2\theta} - \frac{\omega_0^2}{2\theta}$ com $s^2(t)\dot{\gamma}(t) = \text{cte}$. E substituindo em (A.0.2), (A.0.3) e (A.0.4), conseguimos

$$\begin{aligned} a_N &\rightarrow \frac{m}{\hbar} \frac{\left(\frac{\tilde{Q}_0}{\sqrt{\dot{\gamma}(t)}} \sin[\gamma(t) - \gamma(t')] \right)_{t=t'}}{\frac{\tilde{Q}_0}{\sqrt{\dot{\gamma}(t'')}} \sin[\gamma(t'') - \gamma(t')]} \\ &= \frac{m}{\hbar} \frac{\sqrt{(\omega_0 + \theta t'')(\omega_0 + \theta t')}}{\sin \left[\frac{(\omega_0 + \theta t'')^2}{2\theta} - \frac{(\omega_0 + \theta t')^2}{2\theta} \right]}, \end{aligned}$$

depois,

$$\begin{aligned} q_N &\rightarrow \frac{m}{2\hbar} \frac{\left(s(t) \sin[\gamma(t) - \gamma(t')] \right)_{t=t''}}{s(t'') \sin[\gamma(t'') - \gamma(t')]} \\ &= \frac{m}{2\hbar} \left\{ -\frac{\theta}{2(\omega_0 + \theta t'')} + (\omega_0 + \theta t'') \cot \left[\frac{(\omega_0 + \theta t'')^2}{2\theta} - \frac{(\omega_0 + \theta t')^2}{2\theta} \right] \right\} \end{aligned}$$

e finalmente

$$\begin{aligned} p_N &\rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\sin^2[\gamma(t' + \epsilon) - \gamma(t')]}{\dot{\gamma}(t' + \epsilon)} \int_{t'+\epsilon}^{t''} dt \frac{\dot{\gamma}(t)}{\sin^2[\gamma(t) - \gamma(t')]} \right) \\ &= \frac{m}{2\hbar} \left((\omega_0 + \theta t') \cot \left[\frac{(\omega_0 + \theta t'')^2}{2\theta} - \frac{(\omega_0 + \theta t')^2}{2\theta} \right] - \frac{\theta}{2(\omega_0 + \theta t')} \right) \end{aligned}$$

Portanto, o propagador pode ser escrito como,

$$\begin{aligned}
K(x'', t''; x', t') &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar} \frac{\sqrt{(\omega_0 + \theta t'')(\omega_0 + \theta t')}}{\sin[\gamma(t'') - \gamma(t')]}} \\
&\times \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left((\omega_0 + \theta t') \cot[\gamma(t'') - \gamma(t')] - \frac{\theta}{2(\omega_0 + \theta t')} \right) x'^2 \right] \\
&\times \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left((\omega_0 + \theta t'') \cot[\gamma(t'') - \gamma(t')] - \frac{\theta}{2(\omega_0 + \theta t'')} \right) x''^2 \right] \\
&\times \exp \left(-\frac{im}{2\pi\hbar} \frac{\sqrt{(\omega_0 + \theta t'')(\omega_0 + \theta t')}}{\sin[\gamma(t'') - \gamma(t')]} x'' x' \right),
\end{aligned}$$

permitindo assim obter o estado fundamental $\psi(x', t') = \left(\frac{m\omega(t')}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega(t')}{2\hbar} x'^2 \right)$ evoluído como

$$\tilde{\psi}(x'', t'') \cong \sqrt{\frac{a}{\frac{m\omega(t')}{\hbar} - 2ip}} \left(\frac{m\omega(t')}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\left(\frac{a^2}{4\left(\frac{m\omega(t')}{2\hbar} - ip \right)} - iq \right) x''^2}.$$

Agora, permitamos calcular a probabilidade de encontrar o sistema no estado fundamental no final da evolução, i.e, devemos calcular $|\int dx'' \tilde{\psi}^*(x'', t'') \psi(x'', t'')|^2$. Em primeiro lugar,

$$\begin{aligned}
\int dx'' \tilde{\psi}^*(x'', t'') \psi(x'', t'') &= \left(\frac{m\omega(t'')}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\frac{m\omega(t')}{\hbar} - 2ip}} \int dx'' e^{-\left(\frac{a^2}{4\left(\frac{m\omega(t')}{2\hbar} - ip \right)} + iq + \frac{m\omega(t')}{2\hbar} \right) x''^2} \\
&= \left(\frac{am\omega(t')}{\hbar \left(\frac{a^2}{2} - 2qp + \frac{m^2\omega^2(t')}{2\hbar^2} + i(q+p) \frac{m\omega(t')}{\hbar} \right)} \right)^{1/2} \equiv \mu.
\end{aligned}$$

Plotando a probabilidade $|\mu|^2$ em função do tempo, para vários valores de θ como observamos na Fig. A.0.1, percebemos que quando se aumenta o valor de θ a probabilidade de atingir o estado fundamental no tempo t'' se reduz.

Figura A.0.1 – Gráfico da probabilidade $|\mu|^2$ em função do tempo. A linha roxa e azul foram feitas para os valores de $\theta = 1$ e $\theta = 0.05$ respectivamente, usando $\hbar = \omega_0 = m = 1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Agora, com o objetivo de obter a condição que garanta uma evolução adiabática fazemos uma expansão em series de Taylor de $\chi \equiv \theta t''$ considerando as primeiras ordens e supondo um tempo inicial $t' = 0$ e $m = \hbar = 1$, obtendo assim

$$|\mu|^2 \approx 1 + \frac{(1 + \omega_0^2 t''^2)^2}{16\omega_0^2} \chi^2,$$

quer dizer que se $\frac{(1 + \omega_0^2 t''^2)^2}{16\omega_0^2} \chi^2 \ll 1$, ou seja

$$\theta \ll \frac{4\omega_0}{t''(1 + \omega_0^2 t''^2)}, \quad (\text{A.0.5})$$

podemos garantir com alta probabilidade que o sistema se mantenha ao final da evolução no estado fundamental. Por outro lado, permitamos analisar a parte temporal da frequência do oscilador θt usando uma decomposição de Fourier,

$$\tilde{f}(\omega) = \int_0^{t''} dt \theta t e^{-i\omega t} = \left\{ e^{it''\omega} (1 - it''\omega) - 1 \right\} \frac{\theta}{\omega}.$$

Podemos notar que $|\tilde{f}(\omega)|$ cresce linearmente com o tempo da evolução t'' , quer dizer que a amplitude de probabilidade associada a componente ω_0 da decomposição de Fourier da força externa aumenta proporcionalmente com o tempo. Isto faz com que o fenômeno de ressonância torne-se cada vez mais intenso, fazendo com que o teorema adiabático fique inconsistente (7). Assim para garantir tal consistência, é necessário realizar uma evolução

curta e garantir que θ decresça com o tempo ($\theta \sim t''^{-1}$ para uma evolução curta) como deduzimos em (A.0.5) para assim obter o estado final desejado.