



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CAMPUS VII – GOVERNADOR ANTÔNIO MARIZ
CENTRO CIÊNCIAS EXATAS E SOCIAIS APLICADAS
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA**

ÍTALLO BARBOSA DA SILVA

**PROPOSTA DE IMPLEMENTAÇÃO DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM
ESTRUTURAS DE GRAFENO**

**PATOS - PB
2017**

ÍTALLO BARBOSA DA SILVA

**PROPOSTA DE IMPLEMENTAÇÃO DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM
ESTRUTURAS DE GRAFENO**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentada ao Programa de Graduação
em Física da Universidade Estadual da
Paraíba, como requisito parcial à obtenção
do título de Licenciado em Física.
Área de concentração: Física.

Orientador: Prof. Dr. Everton Cavalcante.

**PATOS - PB
2017**

É expressamente proibido a comercialização deste documento, tanto na forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

S586p Silva, Itallo Barbosa da.

Uma proposta de implementação de Computação Quântica em estruturas de grafeno [manuscrito] : / Itallo Barbosa da Silva. - 2017.

20 p. : il. colorido.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências Exatas e Sociais Aplicadas, 2017.

"Orientação : Prof. Dr. Everton Cavalcante, Coordenação do Curso de Física - CCEA."

1. Grafeno. 2. Defeitos Topológicos. 3. Computação Quântica.

21. ed. CDD 004

ÍTALLO BARBOSA DA SILVA

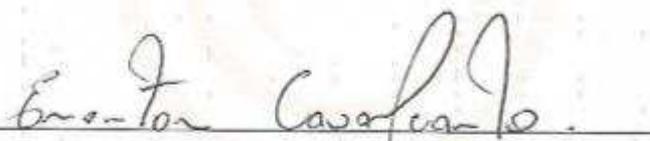
PROPOSTA DE IMPLEMENTAÇÃO DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM
ESTRUTURAS DE GRAFENO

Artigo apresentado ao Programa de Graduação em Física da Universidade Estadual da Paraíba, como requisito parcial à obtenção do título de Licenciado em Física.

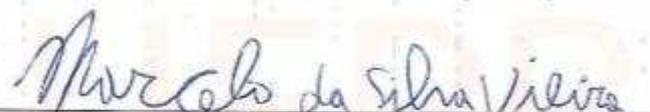
Área de concentração: Física.

Aprovada em: ___/___/___.

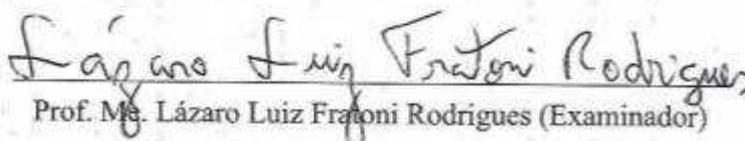
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Everton Cavalcante (Orientador)
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. Marcelo da Silva Vieira (Examinador)
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Msc. Lázaro Luiz Fraxoni Rodrigues (Examinador)
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)

“A natureza é um enorme jogo de xadrez disputado por deuses, e que temos o privilégio de observar. As regras do jogo são o que chamamos de física fundamental, e compreender essas regras é a nossa meta.”

Richard Feynman

PROPOSTA DE IMPLEMENTAÇÃO DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA EM ESTRUTURAS DE GRAFENO

Ítallo Barbosa da Silva*

RESUMO

A nanotecnologia é uma área que vem crescendo nos últimos anos, sabemos que cada vez mais os materiais irão se desenvolver nessa área, pois a cada dia que passa a tecnologia evolui e tende a diminuir cada vez mais o tamanho dos seus aparelhos. Neste trabalho, será apresentado o grafeno, como se deu a sua descoberta e suas propriedades eletrônicas, propriedades estas que fazem do grafeno um material interessante de ser estudado e que desperta a curiosidade da comunidade científica devido ao seu enorme potencial. Será tratado ainda os defeitos topológicos e como esses defeitos podem ser introduzidos no grafeno e alguns dos efeitos que podemos tratar a partir destes defeitos, como por exemplo, o efeito Aharonov-Bohm e o efeito Aharonov-Casher.

Explanaremos sobre a computação quântica, como se iniciou e como vem se desenvolvendo. Trataremos os conceitos de bits quânticos e portas quânticas, sempre utilizando analogia com a computação clássica e comparando-as. Ainda neste ensejo, apresentaremos uma proposta de implementação desta no grafeno.

Palavras-Chave: Grafeno; Defeitos Topológicos; Computação Quântica.

1 INTRODUÇÃO

O grafeno é um material inteiramente bidimensional[1], com apenas um átomo de espessura, e sua rede de átomos é disposta no formato hexagonal. Sendo este formado por átomos de carbono. Por muito tempo, acreditou-se que o grafeno fosse apenas teórico, já que houveram várias tentativas frustradas de isolar o material de maneira estável. Porém, após anos de estudos, Geim e Novoselov conseguiram obtê-lo em laboratório.

A busca pelo grafeno foi por muito tempo considerada impossível, pois se acreditava que não seria capaz sintetizar o material devido a sua instabilidade termodinâmica, teoria esta que foi defendida por Rudolf Pierls e Lev Landau. Sendo assim, supunha-se que redes 2D poderiam somente existir como uma parte integrante de uma rede 3D, como ocorre no grafite.

* Aluno de Graduação em Licenciatura em Física na Universidade Estadual da Paraíba – Campus VII.
Email: barbosaitallo@gmail.com

Teoricamente, esta estrutura já vem sendo estudada há mais de 60 anos, tendo início com os estudos de Pierls e Landau [2][3] (citação), este argumento também foi utilizado por Mermin mais tarde [4] (citação) e outros nomes que tiveram grande contribuição para o advento do grafeno.

Mais tarde com os trabalhos de Wallace sobre as estruturas de banda do grafite[5], seu ponto de vista contrastava com a daquela época, pois ele já imaginava uma estrutura puramente bidimensional. Estes estudos serviram como um ponto de partida para um estudo mais aprofundado sobre o grafite, que teria muita importância mais tarde na descoberta dos fulerenos e nanotubos de carbono. Ele observou a estrutura eletrônica do grafite e utilizou cálculos baseado nas aproximações da estrutura do grafeno. O mesmo método é também utilizado no estudo de fulerenos e nanotubos de carbonos, visto que estes são derivados do grafeno.

Em 1985, a equipe composta por Kroto, Smalley e Curl[6] veio a descobrir o fulereno no ano de 1985, feito este que lhes rendeu o prêmio Nobel, que veio ser outorgado apenas no ano de 1996. Esta nova forma cristalina do carbono foi obtida através da vaporização do carbono, que pode ser feita com lasers ou arcos eletrizados usando eletrodos de grafite.

Logo após veio a descoberta de Iijima[8], na década de 90, sobre os nanotubos de carbono, que veio a ser estimulada após a descoberta do C_{60} e outros fulerenos. Os nanotubos de carbono foram produzidos por um método similar ao que foi utilizado na síntese do fulereno. Sólidos formados integralmente por carbono, principalmente no estado de hibridização sp^2 , podem criar outras formas de estruturas de grafite.

Esse novo material tem estrutura e propriedades eletrônicas que fez abrir novos horizontes para pesquisas em diversas áreas da Física, principalmente em Física da matéria condensada.

Esse artigo está disposto da seguinte forma: na seção I será feita uma introdução sobre todo o artigo, na seção II falaremos sobre o que é grafeno e as suas propriedades eletrônicas, na seção III discutiremos sobre os defeitos topológicos e na seção IV sobre a computação quântica.

2 O GRAFENO

Por volta de 2004, os físicos russos André Geim e Konstantin Novoselov[7], juntamente com sua equipe na Universidade de Manchester, na Inglaterra,

conseguiram isolar pequenos filmes finos que possuíam apenas uma única camada e de forma estável, a temperatura ambiente. Apesar de que o grafeno ainda precise ser aperfeiçoado, este material possui um potencial enorme a ser explorado de modo que futuramente iremos usufruir de sua capacidade e as suas aplicações.

Dentre os modelos baseados exclusivamente em carbono, podemos citar os seguintes: diamante, grafite, grafeno, fulereno e nanotubos de carbono. A capacidade do carbono se combinar e apresentar diferentes estruturas se dá pelo fato do carbono hibridizar de várias formas, sendo elas: sp , sp^2 e sp^3 . Dentre estes, o que mais nos interessa é o sp^2 , pois este acontece quando um orbital s se liga a um orbital p , originando assim mais três orbitais direcionais, formando entre si um ângulo de aproximadamente 120° e estes orbitais encontram-se em um plano. Quando os átomos hibridizam no tipo sp^2 ocasiona uma estrutura hexagonal, como ocorre no grafite, e conseqüentemente, ocorre também no grafeno.

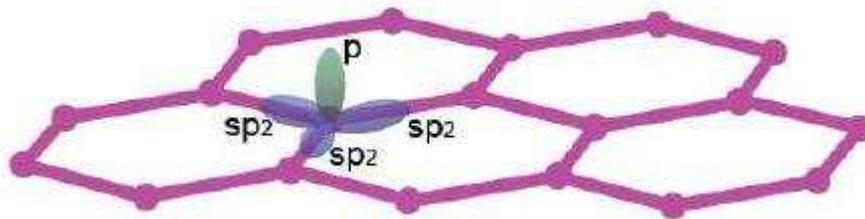


Figura 1 – Representação dos orbitais atômicos em uma rede de grafeno.

Dessa forma, podemos trabalhar com vários modelos que nos auxiliam na compreensão da estrutura eletrônica do material e dos fenômenos que ocorrem dentro dele. Dentre outros podemos citar o tight-binding, que é um modelo que nos permite uma aproximação onde podemos considerar que os elétrons mais próximos de seus respectivos núcleos atômicos estão fortemente ligados a eles, e são descritos por seus orbitais atômicos, com níveis discretos de energia e interage com os primeiros vizinhos, ocasionando uma sobreposição dos orbitais dos elétrons que giram em torno de cada átomo.

O grafeno é um material recém-descoberto e que possui várias aplicações na área da nanociência, onde cada vez mais estudos vêm sendo realizados afim de explorar suas propriedades que vem se mostrando excepcionais. Apesar de ser considerado um material de grande potencial, ele pode ser obtido com um baixo custo e estas técnicas podem ser realizadas à temperatura ambiente.

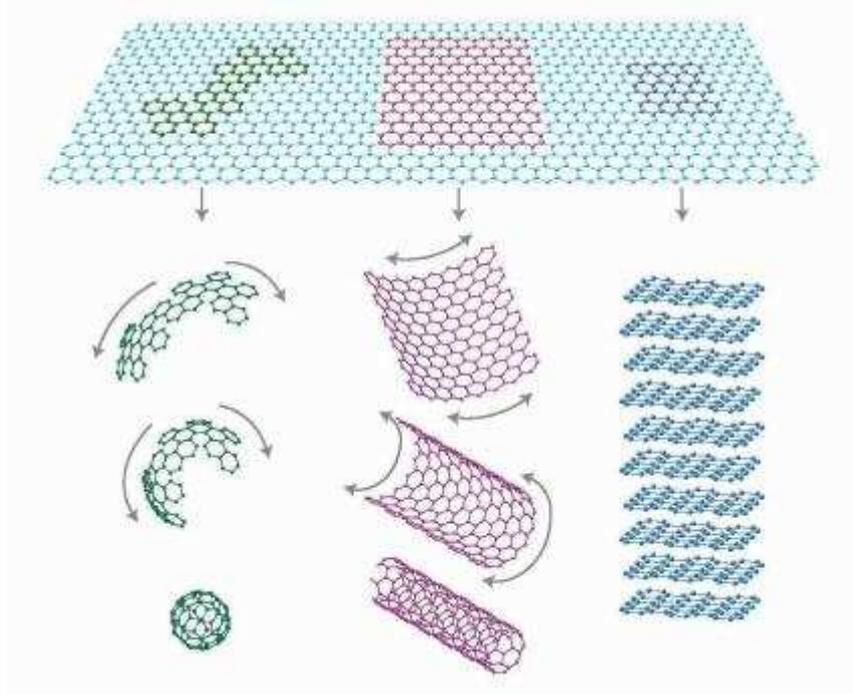


Figura 2 – Uma ilustração de como o grafeno pode originar outras formas alotrópicas do carbono.

Além disso, este novo material possui estrutura e propriedades eletrônicas, mecânicas, ópticas e térmicas que o diferenciam de qualquer outro material, possuindo ainda alta mobilidade de portadores de carga, transparência e alta resistência a tensão mecânica. Dessa forma, o grafeno pode ser explorado por diversos ramos da ciência devido à sua versatilidade.

Já foi mostrado aqui que o grafeno é uma estrutura hexagonal[9], mas também podemos observar na figura 3, o mesmo como uma estrutura triangular, com base em dois átomos por unidade de célula. Desta forma, podemos escrever os vetores da rede da seguinte maneira:

$$a_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}) ; a_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}) \quad (1)$$

Onde $a \simeq 1,42 \text{ \AA}$ (angstrom) é a distância entre o carbono-carbono. Os vetores da rede recíproca é dado por:

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}) ; b_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}) \quad (2)$$

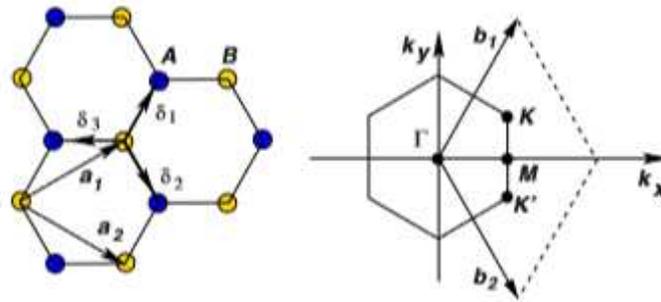


Figura 3 – Esquerda: estrutura de grafeno feita de duas redes triangulares; Direita: Zona de Brillouin, região onde se encontra os pontos K e K', aqui localizamos os cones de Dirac.

Os três vizinhos mais próximos são dados por

$$\delta_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}) ; \delta_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}) ; \delta_3 = (-a)(1,0) \quad (3)$$

Se observarmos o gráfico de dispersão de energia (fig. 4) na rede hexagonal do grafeno, é fácil de notar que a banda de valência toca a banda de condução apenas nos pontos K e K', em um formato que se assemelha a um cone, estes pontos são chamados de pontos Dirac. Esta é a região de maior interesse para a maioria dos fenômenos físicos já que em todos os outros existe um *gap* entre a banda de valência e a banda de condução.

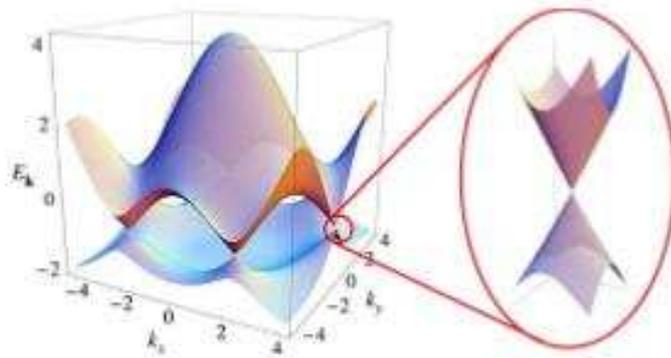


Figura 4 – Gráfico de dispersão de energia na rede hexagonal do grafeno; À direita é exibida uma ampliação das bandas da região nos pontos Dirac.

O estudo das propriedades eletrônicas do grafeno desempenha um papel importante, pois a sua dimensionalidade, duas dimensões, é a base da compreensão das propriedades eletrônicas dos demais alótropos do carbono.

Contudo, o processo de síntese do grafeno – assim como de praticamente todos os materiais – ocasiona o aparecimento de defeitos na rede. Defeitos esses conhecidos como defeitos topológicos. E descritos na seção que segue.

3 DEFEITOS TOPOLÓGICOS

Nesta seção será feita uma abordagem sucinta sobre os defeitos topológicos em sólidos, em especial nos cristais. Sabe-se que todo cristal produzido em laboratório possui imperfeições, devido essas imperfeições no processo de produção de materiais encontramos as impurezas e os defeitos, que pode ser originado de diversas formas. Se considerarmos um material bidimensional, como é o caso do grafeno, sabe-se que o defeito presente na rede possui influência sobre as propriedades eletrônicas[10], mecânicas, ópticas e térmicas de um material.

Essas imperfeições podem ser geradas no grafeno devido a sua topologia, temos uma rede que inicialmente é totalmente hexagonal, mas podemos quebrar essa continuidade introduzindo defeitos, ou seja, transformando os hexágonos em pentágonos ou heptágonos.

Ao quebrar a continuidade do material, podemos ocasionar uma transição de fase, estas podem variar de acordo com certos parâmetros. Existe vários tipos de transições de fase, por exemplo podemos citar a de zero, primeira e segunda ordem onde estes são definidos pelas suas derivadas de energia livre, onde podemos observar assim a sua descontinuidade. Uma teoria que descreve bem uma transição de fase de segunda ordem, é a teoria de quebra de simetria de Landau, onde ele afirma que duas fases são diferentes porque tem diferentes simetrias e a transição de fase é uma transição que altera a simetria do material.

Também temos transições de fase de ordem infinitas, onde não se apresenta descontinuidade e nem quebra de simetria, esse tipo de transição é conhecida como Transição de Kosterlitz-Thouless.

Vejamos o fulereno C_{60} , temos sessenta átomos de carbono dispostos em uma configuração esférica. Esta curvatura da esfera é criada quando introduzimos 12 pentágonos em uma configuração antes era inteiramente hexagonal.

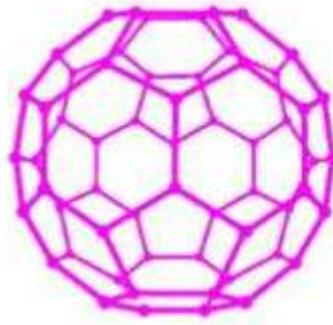


Figura 5 – O fulereno C60, é possível notar que os pentágonos são necessários para que tenhamos o formato esférico.

Em 1959, os físicos David Bohm e Yakir Aharonov[11] publicaram um artigo onde eles constataram que uma partícula ao passar por um campo magnético sentiria a presença desse campo, isto é óbvio, porém eles comprovaram experimentalmente que o potencial vetor também sentia a presença desse campo magnético, o que até então era apenas uma ferramenta matemática possuía um sentido físico.

Diferentemente da eletrodinâmica clássica, na mecânica quântica os potenciais não são eliminados das equações básicas de movimento, mas os próprios também não possuem significado independente.

A dinâmica de uma partícula carregada, desde que os campos sejam nulos, esta não se modifica, já que o seu movimento é regido pela força de Lorentz. Podemos então, escrever os campos elétrico e magnético utilizando os potenciais vetor (A) e escalar (ϕ).

O exemplo mais simples que temos do efeito Aharonov-Bohm é o de um feixe de elétrons contorna um solenoide longo que possui um campo magnético no seu interior, essa demonstração foi feita experimentalmente com um feixe de elétrons coerentes, o feixe então se divide em duas partes e se recombina ao passar pelo solenoide. O potencial vetor, nessa situação, não pode ser zero em todos os lugares fora do solenoide.

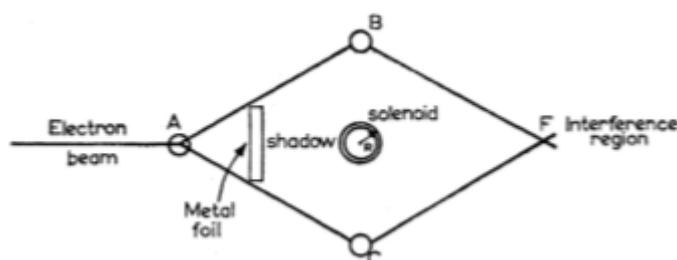


Figura 5 – Demonstração experimental da interferência no potencial vetor.

É importante ressaltar que ao contornar as fendas as partículas sofrem interferência e também existe um ganho de fase associado a essas partículas depois que atravessam o solenoide.

O resultado da experiência, de acordo com a teoria quântica, foi que um elétron pode ser influenciado pelo potencial vetor, até mesmo nas regiões onde o campo magnético seja excluído dele, ou seja, o fluxo Φ pode afetar as partículas mesmo fora do alcance do campo magnético. Este fluxo Φ não envolve o campo magnético e sim o potencial vetor, que de acordo com o teorema de Stokes não se anula fora do solenoide, pois a sua integral de linha deve ser igual ao fluxo Φ . Então, o potencial vetor pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\vec{A}(r) = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\varphi} \quad (4)$$

Onde r e φ são coordenadas polares e $\hat{\varphi}$ é o angulo azimutal.

Considerando que a partícula possua uma carga q e que percorra um certo caminho em uma região com campo magnético nulo, mas com potencial não-nulo, esta partícula adquire uma fase φ , que é dada por

$$\varphi_{AB} = \frac{2\pi q}{h} \int_S \vec{A} \cdot d\vec{s} \quad (5)$$

Desde que as partículas tenham o mesmo ponto de chegada e partida, mas que viajem por dois caminhos distintos, estas irão adquirir uma fase diferente ($\Delta\varphi$) que é determinado pelo fluxo magnético Φ_B através da área entre os caminhos, é dado por:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi q \Phi_B}{h} \quad (6)$$

Para tralhamos o efeito Aharonov-Casher[12], podemos então considerar um solenoide neutro e suficientemente longo, de modo que o campo magnético produzido por ele esteja totalmente no seu interior, assim o solenoide interage com a partícula, produzindo então um campo elétrico, essa situação quando uma partícula de carga neutra com momento magnético ($\vec{\mu}$) interage com o campo elétrico.

Uma vez que temos a interação partícula-solenoide, podemos então encontrar a ação sofrida pela partícula após percorrer um certo caminho e, conseqüentemente, o ganho da fase.

A fase adquirida pelo efeito Aharonov-Casher é dada por:

$$\varphi_{AC} = \frac{2\pi q}{hc^2} \int_S (\vec{E} \times \vec{\mu}) \cdot d\vec{s} \quad (7)$$

Onde q é a sua carga e $\vec{\mu}$ é o momento magnético.

Podemos observar que o efeito Aharonov-Casher, que é semelhante ao efeito Aharonov-Bohm, porém agora consideramos uma partícula neutra ao invés de uma partícula carregada. Outra coisa interessante no efeito Aharonov-Casher é que o campo magnético sofrerá a ação de uma linha de cargas, já no efeito Aharonov-Bohm ocorre uma influência sobre o potencial vetor ao atravessar um campo magnético contido em um solenoide.

4 COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

No início da década de 80, Richard Feynman escreveu um artigo[13], onde afirmou que um sistema quântico não pode ser simulado em um computador clássico “é impossível representar os resultados da mecânica quântica com um dispositivo universal clássico”. Em seguida outros autores começaram a escrever sobre o assunto.

Em 1985, Deutsch propôs um modelo universal para computação quântica que seria o Máquina de Turing era para a computação clássica[14], porém neste modelo seria acrescentado algumas características a esta máquina, que lhe permitia a representação de sobreposições.

Logo em seguida, Shor propôs um algoritmo para computadores quânticos que seria capaz de fatorar números inteiros em tempo polinomial[15].

Atualmente, a empresa canadense D-Wave, produz computadores quânticos e lançou o seu primeiro computador quântico em 2011, o D-Wave One, a sua configuração contava 128 *qbits*. Porém, os computadores quânticos ainda não são vendidos comercialmente para atividades rotineiras, mas já vem sendo utilizado para realizar tarefas específicas como decifrar DNA, quebra de criptografia, entre outros.

A alta capacidade dos computadores quânticos se dá por vários fenômenos como, por exemplo, superposição de estados, tunelamento e emaranhamento.

Um dos maiores problemas que os teóricos vêm encontrando é o caso da degenerescência, o problema ocorre quando temos alguns autovalores são iguais, ou seja, $a_n = a_m$. Quando isso acontece temos autovetores que correspondem aos autovalores degenerados, assim eles não são completamente definidos e é

necessário construir uma nova base verificando que todos os autovetores criados sejam ortogonais.

Na computação quântica comumente é utilizada a notação de Dirac para representar estados quânticos[16], essa notação facilita a representação de estados e transformações quânticas. Em várias literaturas podemos encontrar a notação de Dirac como notação *braket*, devido a sua forma de representar os vetores.

Um vetor \vec{v} é representado na notação de Dirac como $|v\rangle$ (se lê “ket”), assim temos:

$$V = (v_1, v_2) \Rightarrow |v\rangle = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

Ainda temos também a representação do vetor $\langle v|$ (se lê “bra”), o qual é igual ao complexo conjugado de $|v\rangle$, assim temos:

$$\langle v| = \begin{bmatrix} v_1^* \\ v_2^* \end{bmatrix} \Rightarrow \langle v| = (v_1^* \ v_2^*) \quad (9)$$

Na computação clássica, podemos descrever de forma bem genérica, que o computador clássico é uma máquina que compreende um conjunto de dados, codificados em 0 e 1, o que chamamos de *entradas*, também executa cálculos e gera *saídas* que são codificadas em 0 e 1. Convenciona-se que: o 0 é um estado de baixo potencial elétrico e que o 1 é um estado de alto potencial elétrico.

Os *zeros e uns* são o que chamamos de *bits*, eles são responsáveis pelo processamento de informações que o computador realiza.

De forma análoga, ocorre nos computadores quânticos onde possuímos os *bits quânticos*, ou *qbits*, eles são os estados que podemos assumir em computadores quânticos.

A representação dos *qbits* é diferente dos bits clássicos, os valores de 0 e 1 são substituídos por vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$, que são representados da seguinte forma:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} ; |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

A maior diferença que encontramos entre o *bit clássico* e o *qbit*, é que o *qbit* pode ser escrito como uma combinação linear de $|0\rangle$ e $|1\rangle$, ou seja

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (11)$$

Acabamos de demonstrar a nossa base computacional, onde o vetor $|\psi\rangle$ é a *sobreposição dos vetores* $|0\rangle$ e $|1\rangle$ e α e β são números complexos e chamados de *amplitudes*.

Os vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$ são denominados base computacional pois qualquer outro vetor pode ser criado através de uma combinação linear destes.

Nos computadores clássicos o processamento de informação se dá através de circuitos lógicos, que são agrupamentos de portas lógicas as quais executam operações sobre os bits. Algumas portas lógicas são geralmente utilizadas nesses circuitos, como será mostrado na figura abaixo:

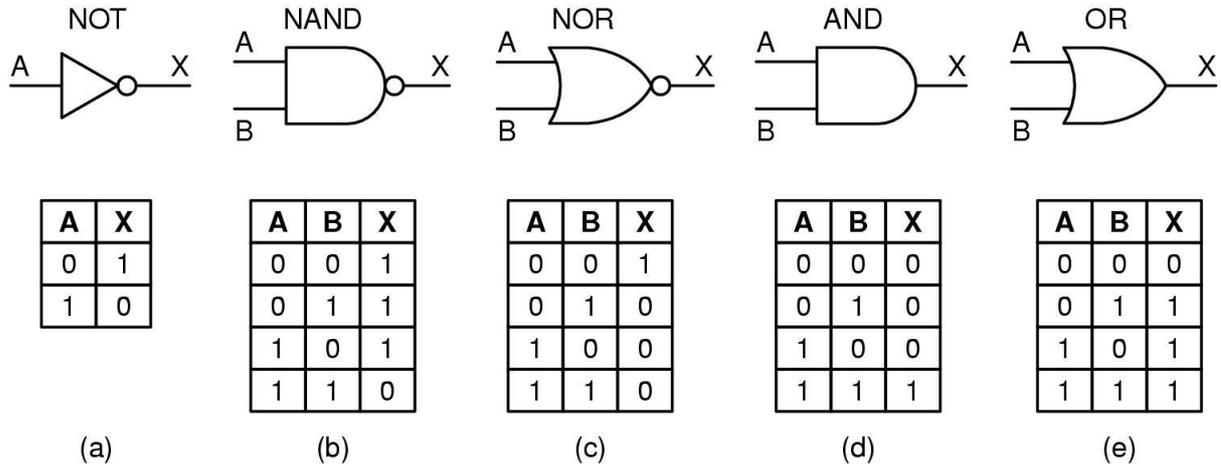


Figura 5 – Portas lógicas clássicas

Enquanto nos computadores quânticos esse processamento ocorre devido ao agrupamento de portas quânticas, as quais realizam operações sobre os *qbits*. Assim, portas quânticas podem ser descritas como operadores ou matrizes, isto tem grande importância pois qualquer matriz 2x2 pode representar portas quânticas que atuam sobre um *qbit*. Um exemplo simples, porém, muito utilizado, são as matrizes de Pauli, que representadas na sua forma matricial podem realizar operações sobre um *qbit*.

$$X = \sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, Y = \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, Z = \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

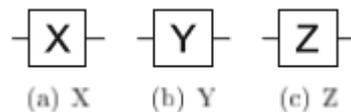


Figura 3 – Portas de Pauli

Fazendo uso de portas quânticas podemos realizar operações sobre um *qbit* de infinitas maneiras, pois as matrizes 2x2 também são infinitas. Mostraremos a seguir como podemos realizar estas operações utilizando matrizes de Pauli ou portas de Pauli.

Primeiramente, será mostrada a porta X que é definida como

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

A porta X corresponde a porta clássica NOT, pois $X|0\rangle = |1\rangle$ e $X|1\rangle = |0\rangle$, como pode se ver abaixo

$$X|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |1\rangle \quad (14)$$

$$X|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |0\rangle \quad (15)$$

A porta Y pode ser representada na forma apresentada abaixo

$$Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

Se aplicarmos a porta Y a um *qbit* $|\psi\rangle = |0\rangle + |1\rangle$, teremos o seguinte resultado

$$Y|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i\alpha \\ i\beta \end{bmatrix} \quad (17)$$

Também podemos realizar operações idênticas com a porta Z

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (18)$$

Ao ser aplicada a um estado genérico $|\psi\rangle = |0\rangle + |1\rangle$, o resultado será

$$Z|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ -\beta \end{bmatrix} = |0\rangle - |1\rangle \quad (19)$$

Então como vemos nas equações acima, as portas Y e Z geram uma fase na função de onda. A porta Y gera uma fase global na função de onda, enquanto que a porta Z gera uma fase na combinação de vetores da base.

Podemos ainda trabalhar com outras portas quânticas, dentre elas a porta de Hadarmard, Phase e CNOT. Destas três citadas, a porta de Hadarmard é a mais conhecida e talvez até a mais utilizada, ela prepara a entrada de um circuito quântico colocando um *qbit* em superposição com mesma probabilidade para os dois estados. A porta de Hadarmard é escrita da seguinte forma:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

5 CONCLUSÃO

O trabalho teve como intuito mostrar a versatilidade do grafeno, de modo que, se manipulado da forma adequada, podemos implementar a computação quântica neste material fazendo uso, principalmente, da sua topologia. Também tratamos das propriedades físicas do grafeno, que através delas podemos perceber o potencial que o material possui e por que existe tanta expectativa em torno do mesmo para que

certo um dos materiais mais usados futuramente e que também contribua no desenvolvimento tecnológico.

Mostramos que, quando alteramos a rede do grafeno, defeitos são gerados, e a partir destes podemos observar efeitos análogos aos efeitos Aharonov-Bohm e Aharonov-Casher, que por sua vez, se tiverem suas fases não-Abelianas. Ou seja, escritas em termos das matrizes de Pauli, podemos implementar uma computação quântica na rede do grafeno. A importância do desenvolvimento desse material se mostra de grande relevância, principalmente no âmbito tecnológico, uma vez que teremos computadores com desempenho infinitamente melhor que os que são usados nos dias de hoje.

Vale ressaltar que este trabalho foi fruto de cotas do PIBIC e rendeu alguns trabalhos publicados em eventos de âmbito nacional e também internacional.

PROPOSAL OF IMPLEMENTATION OF QUANTUM COMPUTATION IN GRAPHENE STRUCTURES

ABSTRACT

Nanotechnology is an area that has been growing in recent years, we know that more and more materials will develop in this area, because with each passing day technology evolves and tends to decrease more and more the size of their devices. In this work, graphene will be presented, as if its discovery and its electronic properties, which make graphene an interesting material to be studied and that arouses the curiosity of the scientific community due to its enormous potential. Topological defects will also be treated and how these defects can be introduced in graphene and some of the effects we can treat from these defects, such as the Aharonov-Bohm effect and the Aharonov-Casher effect.

We will explain about quantum computing, how it started and how it has been developing. We will deal with the concepts of quantum bits and quantum gates, always using analogy with classical computation and comparing them. Also in this occasion, we will present a proposal to implement this in graphene.

Keywords: Graphene. Topological Defects. Quantum Computation.

REFERÊNCIAS

- [1] Geim, A. K. & Novoselov, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials*. 6, 183-191(2007).
- [2] Peierls, R. E. Quelques proprietes typiques des corps solides. *Ann. I. H. Poincare* 5, 177–222 (1935).
- [3] Landau, L. D. Zur Theorie der phasenumwandlungen II. *Phys. Z. Sowjetunion* 11, 26–35 (1937).
- [4] Mermin, N. D. Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.* 176, 250–254 (1968).
- [5] Geim, A. K. & Kim, P. Carbon Wonderland. *Scientific American*. 298, 90–97 (2008)
- [6] Wallace, P. R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.* 71, 622–634 (1947).
- [7] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl & R. E. Smalley. C60: Buckminsterfullerene. *Natur.* 318, 1213-1235 (1985).
- [8] S. Iijima. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*. 354, 56-58 (1991).
- [9] A. H. Castro, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Reviews of modern physics*. 81, 109 (2009).
- [10] J.K. Pachos. Manifestations of topological effects in graphene. *Contemporary Physics*. (2008).
- [11] D. Bohm. Y. Aharonov. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. *The Physical Review*, 115 (1959).
- [12] Y. Aharonov. A. Casher. Topological Quantum Effects for Neutral Particles, *Physical Review Letters*, Vol.53, p. 319, 1984.
- [13] R. P. Feynman. Simulating Physics with Computers. *International Journal of Theoretical Physics*. 21, 467-488 (1982).
- [14] D. Deutsch. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London*. 400, 97-117 (1985).
- [15] P. W. Shor. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. on *Foundations of Computer Science*, 35th Annual Symposium. 124-134 (1994).
- [16] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, 2000.