

DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO DE SIMULAÇÃO PARA DETERMINAÇÃO DO TEMPO DE COERÊNCIA EM SUPERCONDUTORES APLICADOS A JUNÇÕES JOSEPHSON DE QUBITS TRANSMON

Autores

Rodrigo de Souza¹

Francisco Tadeu Degasperi²

Resumo

Este trabalho tem o objetivo de apresentar o desenvolvimento, testes e análise de resultados de um modelo de simulação desenvolvido em Python, que possibilita identificar o tempo de coerência de materiais supercondutores (Nióbio, YBCO e Grafeno), utilizados em junções Josephson, em faixas de temperatura e tensão comumente empregadas em qubits transmon. O método empregado é a modelagem físico-matemática com a biblioteca NumPy em ambiente Jupyter Notebook. Como resultados, observou-se que o modelo possibilitou a simulação com adequado nível de fidedignidade fenomenológica e, no caso específico, dos três supercondutores, os resultados mostram que o tempo de coerência de fase (T_2) pode ser determinado para todos os materiais nas condições de temperatura e tensão simuladas. A tensão elevada (1.0 V) reduziu significativamente o T_2 , especialmente para grafeno e YBCO. O Nióbio mantém um bom desempenho de coerência mesmo em tensões mais altas. O grafeno, por outro lado, exibe o menor T_2 , devido à maior dissipação de energia, especialmente em altas tensões. Em síntese, os resultados da simulação nas condições determinadas, indicam que o Nióbio é o material mais adequado para minimizar o impacto da decoerência em qubits transmon.

Palavras-chave: Decoerência. Modelo de simulação. Supercondutores. Junções Josephson. Qubits transmon. Computadores quânticos.

DEVELOPMENT OF A SIMULATION MODEL FOR DETERMINING COHERENCE TIME IN SUPERCONDUCTORS APPLIED TO TRANSMON QUBIT JOSEPHSON JUNCTIONS

Abstract

This work aims to present the development, testing, and analysis of results of a simulation model developed in Python, which enables the identification of the coherence time of superconducting materials (Niobium, YBCO, and Graphene) used in Josephson junctions, under temperature and voltage ranges commonly employed in transmon qubits. The method employed is physical-mathematical modeling using the NumPy library in a Jupyter Notebook environment. As results, it was observed that the model enabled simulation with an adequate level of phenomenological fidelity, and in the specific case of the three superconductors, the results show that the phase coherence time (T_2) can be determined for all materials under the simulated temperature and voltage conditions. Higher voltage (1.0 V) significantly reduced T_2 , especially for graphene and YBCO. Niobium maintains good coherence performance even at higher voltages. On the other hand, graphene exhibits the shortest T_2 due to higher energy dissipation, particularly at high voltages. In summary, the simulation results under the determined conditions indicate that niobium is the most suitable material to minimize the impact of decoherence in transmon qubits.

Keywords: Decoherence. Simulation model. Superconductors. Josephson junctions. Transmon qubits. Quantum computers.

¹ <https://orcid.org/0000-0003-0268-9836>

² <https://orcid.org/0000-0002-8086-7709>

INTRODUÇÃO

A computação quântica, um campo emergente da ciência da computação, visa explorar os princípios da mecânica quântica para criar novos paradigmas no processamento de informações. Diferente dos computadores clássicos, que operam com bits, os computadores quânticos utilizam qubits, unidades de informação que podem existir em múltiplos estados simultaneamente. Esta característica confere a esses sistemas a capacidade de realizar cálculos de forma exponencialmente mais rápida do que os computadores tradicionais, especialmente em tarefas complexas. No entanto, um grande desafio para o adequado funcionamento de computadores quânticos na prática é o fenômeno da decoerência, que impede a manutenção da decoerência quântica dos sistemas durante o processamento da informação.

Os qubits transmon são uma das implementações mais promissoras de qubits baseados em supercondutores. Um transmon é composto por uma junção Josephson, que é um dispositivo quântico construído a partir de materiais supercondutores. Essa junção é formada por duas regiões supercondutoras separadas por um isolante, criando uma barreira que permite o efeito de tunelamento quântico. Em um qubit transmon, a informação é armazenada nas energias de dois estados quânticos distintos. A manipulação desses estados é feita com impulsos de micro-ondas, possibilitando a realização de operações quânticas. A estabilidade e o tempo de coerência dos transmons dependem diretamente das propriedades dos materiais utilizados nas junções Josephson.

As junções Josephson, estruturas que possibilitam o funcionamento dos qubits transmon, são caracterizadas pela capacidade de conduzir corrente elétrica sem resistência, fenômeno característico de materiais supercondutores. Os materiais supercondutores têm a peculiaridade de apresentar resistência elétrica nula quando estão abaixo de uma temperatura crítica. Em tais condições, os elétrons formam pares conhecidos como pares de Cooper, que se movem sem colisões, o que elimina a resistência.

No caso de materiais como o Nióbio, o YBCO (Óxido de Bário, Cobre e Itérbio - Yttrium Barium Copper Oxide) e o Grafeno, essas propriedades supercondutoras podem ser moduladas de diferentes maneiras. O Nióbio (Nb), um metal supercondutor tradicional, tem sido amplamente utilizado em qubits devido à sua alta qualidade e estabilidade. O YBCO, por sua vez, é um supercondutor de alta temperatura que se torna supercondutor a temperaturas mais altas do que o Nióbio, tornando-o uma opção plausível para reduzir os custos de resfriamento. Já o Grafeno, um material bidimensional composto por uma única camada de átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal, caracteriza-se por suas propriedades

eletrônicas exóticas, como alta mobilidade de elétrons, no entanto, sua aplicação prática apresenta desafios em termos de controle da supercondutividade.

A decoerência é um dos maiores obstáculos para o avanço da computação quântica. Esse fenômeno ocorre quando o sistema quântico interage com o ambiente, perdendo sua capacidade de manter a coerência entre os estados quânticos. No caso dos qubits transmon, a decoerência pode ser causada por fatores como flutuações de temperatura, ruído elétrico, interações com o ambiente e falhas nos materiais. A temperatura é um fator crítico, pois em temperaturas mais altas a quantidade de excitações térmicas aumenta, o que pode acelerar a perda de coerência. Neste contexto, é relevante o aprofundamento da compreensão da forma pela qual os materiais supercondutores afetam o tempo de coerência, já que o avanço na tecnologia de supercondutores possibilitará o desenvolvimento de qubits transmon mais estáveis.

O Nióbio é um dos supercondutores promissores a serem empregados na construção de qubits transmon, especialmente devido à sua alta estabilidade e confiabilidade em baixas temperaturas. Suas propriedades são temperatura crítica de 9,25 K, tornando-o adequado para a construção de junções Josephson de alta qualidade. O YBCO, por ser um supercondutor de alta temperatura, possui a vantagem de operar a temperaturas mais elevadas, geralmente em torno de 77 K, o que pode reduzir os custos associados ao resfriamento criogênico. No entanto, seu desempenho em termos de decoerência pode ser influenciado por irregularidades na estrutura cristalina e pela interação com flutuações térmicas, que são mais pronunciadas a temperaturas mais altas.

O Grafeno, embora não seja tipicamente supercondutor em sua forma pura, pode exibir propriedades supercondutoras quando dopado ou em certas condições de temperatura e pressão. Sua estrutura bidimensional oferece vantagens únicas, como a mobilidade elevada de elétrons, que pode potencialmente melhorar a taxa de transmissão de informações quânticas. No entanto, a dissociação de pares de Cooper e a dissipação de energia em altas tensões podem limitar sua eficácia como material para qubits transmon, especialmente em comparação com materiais como o Nióbio e o YBCO.

Neste contexto, a relevância deste trabalho reside no fato de os resultados obtidos poderem contribuir com a melhor compreensão da otimização das condições operacionais de qubits transmon, possibilitando a melhoria da engenharia de dispositivos quânticos. O modelo desenvolvido poderá contribuir com o processo de seleção de materiais supercondutores, visando aplicações futuras em computadores quânticos.

1.1 Objetivo

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo de simulação para a determinação do tempo de coerência de materiais supercondutores utilizados em junções Josephson de qubits transmon, especificamente, Grafeno, Nióbio e YBCO. Através desse modelo, busca-se investigar o impacto das condições de temperatura e tensão nas propriedades de coerência desses materiais, visando identificar o material mais adequado para reduzir ou mitigar esse problema. O modelo considera tanto a dissipação de energia quanto a estabilidade das junções Josephson sob diferentes condições operacionais de temperatura e tensão.

A pesquisa na simulação de materiais supercondutores aplicáveis à computadores quânticos é promissora, já que a escolha do material supercondutor para a construção de qubits transmon tem um impacto direto na viabilidade de um computador quântico funcional. O tempo de coerência, que está diretamente relacionado à estabilidade dos qubits, é um dos principais fatores limitantes para a implementação prática de computadores quânticos. Portanto, entender como os diferentes materiais influenciam esse tempo de coerência é fundamental para o avanço da computação quântica, particularmente no desenvolvimento de sistemas computacionais mais robustos e eficientes.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

A computação quântica se baseia nos princípios da mecânica quântica para realizar operações de forma mais eficiente do que os computadores clássicos em determinadas tarefas. Ao contrário dos bits tradicionais, que assumem um valor de 0 ou 1, os qubits podem representar uma superposição desses estados, permitindo que um computador quântico realize mais operações do que milhares de computadores tradicionais, simultaneamente. Contudo, a computação quântica enfrenta desafios técnicos, sendo o principal deles a decoerência, um fenômeno no qual a informação quântica é perdida devido à interação do sistema quântico com o ambiente externo. A decoerência limita severamente o tempo de operação dos qubits transmon, sendo um dos maiores obstáculos para a realização de computadores quânticos práticos e escaláveis.

Os qubits transmon são uma das arquiteturas emergentes a serem testadas na implementação de qubits em computadores quânticos. Eles são baseados em uma junção Josephson e operam como sistemas de dois níveis, nos quais a energia do qubit está associada à diferença entre os níveis quânticos. A principal vantagem dos qubits transmon é sua robustez

frente a flutuações de carga, tornando-os mais estáveis em comparação com outros tipos de qubits supercondutores, como o qubit Cooper pair box (Sagi *et al.*, 2024).

A junção Josephson, que é a base dos qubits transmon, consiste em duas camadas de supercondutores separadas por um material isolante, o que permite o fenômeno de tunelamento quântico. Esse tunelamento quântico é a base da dinâmica do qubit, pois permite a transição de partículas através de barreiras de energia que, em um sistema clássico, seriam impenetráveis. No caso de um qubit transmon, o tunelamento ocorre entre os dois estados de energia discretos do sistema, permitindo a superposição de estados, o que é fundamental para o comportamento quântico do dispositivo (Willsch *et al.*, 2024).

O comportamento do qubit transmon pode ser modelado usando o Hamiltoniano do sistema, que descreve a energia total do qubit. Em uma aproximação comum, o Hamiltoniano do transmon é dado por uma forma simplificada do Hamiltoniano de um oscilador harmônico não linear (Greenaway *et al.*, 2024). O Hamiltoniano para um transmon é dado pela Equação 1.

$$H = 4E_J \cos(\varphi) - E_C \varphi^2 \quad (1)$$

Onde E_J é a energia da junção Josephson, E_C é a energia de carga do transmon e φ é o ângulo fase da junção Josephson. Esse Hamiltoniano descreve a energia associada tanto à variação da fase na junção quanto à carga do transmon, que está diretamente ligada ao comportamento quântico do sistema.

O tunelamento quântico no transmon é descrito pela transição entre os estados de energia $|n\rangle$ e $|n+1\rangle$ sendo n o número de excitações no sistema. As transições entre os estados de energia podem ser controladas através de pulsos eletromagnéticos aplicados ao sistema, que geram excitações quânticas. Esses pulsos possibilitam a manipulação de estados quânticos, que são usadas em algoritmos quânticos e para a realização de portas lógicas quânticas (Heunisch; Eichler; Hartmann, 2023).

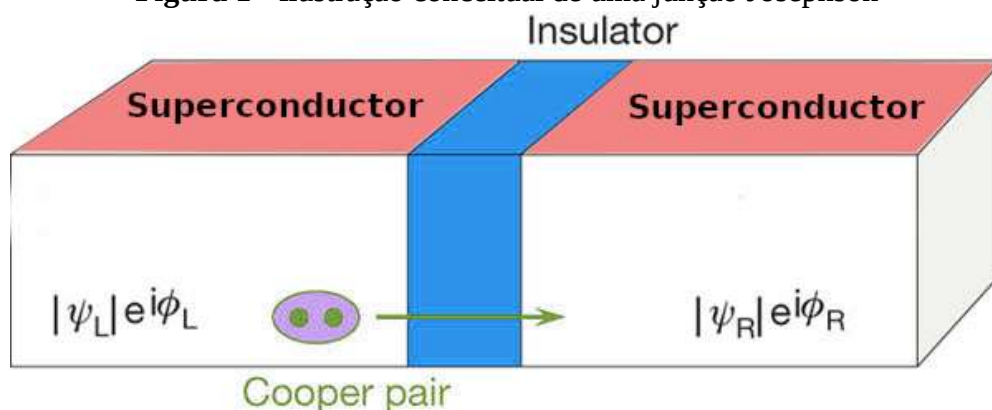
Uma característica importante do qubit transmon é que ele sofre um decaimento ou relaxamento para o estado fundamental ($|0\rangle$) ao interagir com o ambiente, e essa dinâmica é caracterizada pelo tempo de vida do estado excitado. Esse tempo de vida é representado por T_1 , o qual é uma medida de quanto tempo o qubit consegue manter sua coerência longitudinal antes de perder a informação quântica devido à interação com o ambiente. Além disso, outro parâmetro relevante é o tempo de coerência de fase T_2 que é o tempo no qual a superposição de estados do qubit se perde devido a flutuações ambientais, como o ruído térmico ou flutuações

de campo. O tempo T_2 mede a rapidez com que essa perda de coerência ocorre. Quanto maior o T_2 , mais tempo o sistema pode manter sua coerência quântica (Levine *et al.*, 2024).

A eficiência dos qubits transmon está intimamente relacionada ao controle e à mitigação da decoerência. O principal desafio é a tratativa do ruído ambiental que pode induzir flutuações nos parâmetros do sistema, como a energia de carga ou as transições de fase na junção Josephson (Tripathi *et al.*, 2024). Com isso, observa-se a necessidade de se investigar materiais supercondutores que possam melhorar o tempo de coerência desses qubits, como o Nióbio, YBCO e Grafeno, que são os materiais foco deste trabalho. O uso desses materiais pode ajudar a reduzir as perdas de energia e melhorar a estabilidade do qubit.

As junções Josephson são os elementos que possibilitam a operação de qubits supercondutores, como os qubits transmon. Estas estruturas consistem em duas regiões supercondutoras separadas por uma fina camada de material isolante ou barreira, geralmente com uma espessura na ordem de nanômetros (Chen *et al.*, 2024). O nome "Josephson" vem do físico Brian Josephson, que teorizou que, devido ao fenômeno do tunelamento quântico, uma corrente elétrica pode fluir entre os dois supercondutores, mesmo na ausência de uma diferença de potencial. Esse efeito é o princípio básico das junções Josephson e é utilizado para manipular e controlar os estados quânticos dos qubits e é chamado de Efeito Josephson Básico (Pezzè *et al.*, 2024). A Figura 1 ilustra a estrutura de uma junção Josephson.

Figura 1 - Ilustração conceitual de uma junção Josephson



Fonte: Dudek; Mosiadz (2007).

O comportamento da corrente que atravessa uma junção Josephson é descrito pela Lei de Josephson, que define a relação entre a corrente I e a diferença de fase φ entre os dois supercondutores (Germanese *et al.*, 2023). A equação básica é dada por (2):

$$I = I_0 \sin(\varphi) \quad (2)$$

Onde I_0 é a corrente crítica, que é a máxima corrente que pode passar pela junção sem que ocorra a transição para um estado resistivo, e φ é a diferença de fase quântica entre as duas extremidades da junção. Essa diferença de fase é um parâmetro central para a dinâmica da junção, uma vez que a variação da fase pode ser manipulada para gerar estados quânticos desejados, essenciais para a computação quântica.

Quando uma junção Josephson é sujeita a uma diferença de potencial, com interação entre as fases supercondutoras dos dois supercondutores envolvidos, ela apresenta um fenômeno chamado Efeito Josephson Acoplado, que pode resultar na formação de oscilações de corrente com a frequência de Josephson (Matsuo *et al.*, 2023). A equação que descreve essas oscilações é dada por (3):

$$f_j = \frac{2eV}{h} \quad (3)$$

Onde f_j é a frequência de Josephson, e é a carga elementar ($e=1,602176634 \cdot 10^{-19}$ C), V é a tensão aplicada à junção e h , é a constante de Planck ($h=6,62607015 \cdot 10^{-34}$). Essas oscilações possibilitam o controle e a medição da fase da junção de maneira precisa, possibilitando a manipulação dos estados quânticos no qubit.

Em um circuito quântico, a junção Josephson pode atuar de forma não linear, o que é desejável para a implementação de qubits, pois permite a existência de um potencial de energia discreto com níveis de energia bem definidos, já que a não linearidade da junção Josephson faz com que os níveis de energia desses estados sejam desigualmente espaçados. Isso significa que os qubit $|0\rangle$ e $|1\rangle$ têm energias distintas e claramente separadas. Sem a não linearidade, os níveis de energia ficariam muito próximos uns dos outros, dificultando a distinção entre eles e tornando o qubit menos controlável (Virtanen; Heikkilä, 2024).

O parâmetro energia de carga E_c que controla a rigidez da carga na junção, influencia diretamente a frequência das transições e a sensibilidade do sistema a ruídos externos, como flutuações térmicas e de campo. Um E_c alto em relação a E_j torna o sistema menos sensível a ruídos externos (flutuações térmicas e de campo), mas pode dificultar o controle preciso das transições quânticas. Se E_c for baixo, tem-se a facilitação do controle, mas aumenta-se a sensibilidade a ruídos (Shaikhaidarov *et al.*, 2024). O equilíbrio entre esses fatores permite a adequada operação do qubit dentro de parâmetros de estabilidade, reduzindo a sensibilidade a ruídos (flutuações térmicas e de campo); controle, possibilitando operações quânticas precisas

e confiáveis e robustez, aumentando a vida útil e a fidelidade do qubit. O equilíbrio é alcançado quando (4):

$$E_J \sim 5 \cdot E_c \quad (4)$$

Dada a complexidade de alcance do equilíbrio entre E_c e E_J e a ocorrência de ruídos a partir do desequilíbrio, tem-se o surgimento da decoerência como consequência adversa. Ela ocorre devido a interações com o ambiente, que causam a perda de fase e a consequente destruição da coerência quântica do qubit. A resistência à decoerência nas junções Josephson depende de vários fatores, como a qualidade do material supercondutor, as propriedades da barreira isolante, a temperatura e a tensão aplicada. Em particular, a escolha de materiais supercondutores com maior capacidade de manter a coerência em condições extremas de temperatura e tensão, como o Nióbio, YBCO e Grafeno, pode reduzir ou mitigar esses efeitos (Chandrasekhar, 2024).

Os materiais supercondutores são substâncias que, quando resfriadas abaixo de uma temperatura crítica, exibem uma resistência elétrica igual a zero e expulsam campos magnéticos externo, fenômeno conhecido como efeito Meissner. Este comportamento ocorre devido à formação de pares de Cooper (Koblichka *et al.*, 2023).

A supercondutividade é um fenômeno quântico altamente dependente da temperatura e de campos magnéticos. Em sistemas quânticos, como os qubits baseados em junções Josephson, a escolha do material supercondutor afeta diretamente a coerência e a longevidade do estado quântico, sendo fundamental para a construção de dispositivos mais robustos e estáveis (Eremets, 2024).

A classificação dos materiais supercondutores é feita em três categorias principais: Tipo I, Tipo II e HTS (supercondutores de alta temperatura). Os supercondutores Tipo I são caracterizados por uma transição abrupta entre o estado normal e o estado supercondutor e por expelirem completamente os campos magnéticos abaixo de sua temperatura crítica. No entanto, esses materiais não suportam campos magnéticos elevados e entram em estado normal quando expostos a campos magnéticos intensos. Exemplos típicos de supercondutores Tipo I são o mercúrio e o chumbo (Chow; Ainslie; Chau, 2023).

Os supercondutores Tipo II têm uma transição mais gradual entre os estados e permitem que campos magnéticos penetrem parcialmente em sua estrutura, mantendo a supercondutividade até um limite crítico. Supercondutores Tipo II são mais robustos e podem

operar em condições de campo magnético mais altos, sendo mais comuns em aplicações tecnológicas avançadas, como dispositivos de computação quântica. O Nióbio, amplamente utilizado em junções Josephson, é um exemplo de supercondutor Tipo II. Além desses, existem os supercondutores de alta temperatura (HTS), que operam em temperaturas muito mais altas em comparação aos supercondutores convencionais, como o YBCO, que pode ter uma temperatura crítica superior a 90 K (Coombs *et al.*, 2024).

Os supercondutores HTS (supercondutores de alta temperatura) representam uma classe especial de materiais que exibem supercondutividade em temperaturas bem acima de 77 K, a temperatura de ebulição do nitrogênio líquido. O mais notável exemplo de HTS é o YBCO, que possui uma temperatura crítica de aproximadamente 92 K. Esse avanço possibilitou o desenvolvimento de tecnologias mais eficientes e acessíveis, uma vez que não é necessário o uso de hélio líquido para resfriamento, como nos materiais convencionais (Rice *et al.*, 2023).

A principal vantagem dos HTS é sua capacidade de operar em temperaturas mais altas, o que facilita sua aplicação em sistemas práticos, como em dispositivos de computação quântica, onde as junções Josephson podem ser projetadas para operar em temperaturas relativamente mais altas. No entanto, apesar de sua alta temperatura crítica, os HTS podem apresentar maior sensibilidade a flutuações térmicas e dissipação de energia, o que impacta o tempo de coerência de qubits baseados nesses materiais (Genot *et al.*, 2023).

O Nióbio (Nb) é um exemplo clássico de supercondutor Tipo II, sendo utilizado em dispositivos de computação quântica, especialmente em junções Josephson, devido à sua capacidade de manter a coerência em baixas temperaturas. A sua temperatura crítica é de aproximadamente 9.25 K, o que o torna ideal para experimentos em sistemas de computação quântica que operam em temperaturas de 4 K ou abaixo. O Nióbio tem mostrado resultados adequados quando utilizado em qubits, com um tempo de coerência T_2 relativamente alto em comparação com outros materiais (Zarea; Ueki; Sauls, 2023).

O YBCO, um supercondutor HTS, possui uma temperatura crítica de cerca de 92 K, o que permite sua operação em temperaturas mais altas, como a de nitrogênio líquido (77 K). A vantagem do YBCO é sua capacidade de operar em temperaturas mais altas em comparação com supercondutores convencionais, reduzindo o custo e a complexidade do resfriamento. No entanto, o YBCO apresenta algumas limitações, como uma maior suscetibilidade a flutuações térmicas e dissipação de energia, o que pode afetar o desempenho em dispositivos quânticos (Baumann *et al.*, 2023).

O Grafeno, embora não seja supercondutor puro, pode exibir propriedades supercondutoras sob certas condições, especialmente quando combinado com outros materiais. O Grafeno é um material bidimensional composto por uma única camada de átomos de carbono dispostos em uma estrutura hexagonal, o que confere ao material propriedades de condução elétrica e uma alta mobilidade de elétrons. No entanto, sua dissipação de energia, especialmente sob tensões mais altas, pode afetar negativamente o tempo de coerência T_2 em sistemas quânticos (Pangburn *et al.*, 2023).

3 MÉTODO

A escolha do Jupyter Notebook e da NumPy foi baseada na possibilidade de se realizar simulações interativas baseadas em modelagem físico-matemática. O ambiente Jupyter Notebook facilita a experimentação contínua e a visualização em tempo real dos resultados, permitindo o ajuste dos parâmetros do modelo e a observação das consequências de suas variações. Ele também permite integrar facilmente gráficos e tabelas, auxiliando na análise dos dados gerados. A biblioteca NumPy foi escolhida por sua habilidade em lidar com grandes matrizes e realizar operações matemáticas complexas de forma eficiente, fundamental para calcular as variáveis associadas aos tempos de coerência e decoerência dos qubits.

O desenvolvimento do algoritmo seguiu uma sequência lógica, que começou com a definição das equações principais para os tempos de coerência T_1 e T_2 dos materiais supercondutores, ajustadas conforme as características específicas de cada material. A primeira fase envolveu a implementação das equações que representam os efeitos de dissipação de energia e relaxação dos estados quânticos, considerando os parâmetros críticos como a temperatura, tensão e resistividade. Em seguida, foi feito um ajuste fino do modelo para garantir que ele reproduzisse com precisão os resultados observados em condições ideais e não ideais, como a presença de ruído térmico e interferências externas, elementos que impactam diretamente na estabilidade dos estados quânticos.

As variáveis utilizadas no algoritmo para modelar o comportamento dos materiais supercondutores são a temperatura (em Kelvin), a tensão aplicada (em volt) e a resistividade dos materiais. Além disso, o código incorpora as propriedades de dissipação de energia dos materiais, como a capacidade térmica e a permeabilidade magnética, para calcular a interação entre os qubits e o ambiente externo.

Outro ponto importante do algoritmo foi a introdução do fator de material ajustado, que modifica os tempos de decoerência de acordo com as propriedades específicas de cada material.

O ruído térmico, também conhecido como ruído Johnson-Nyquist, foi uma variável adicional integrada ao modelo para representar os efeitos do calor ambiente em torno do sistema quântico. Ele afeta o desempenho do sistema de várias formas, principalmente por meio de flutuações térmicas que alteram a resistência do material e, portanto, o tempo de vida dos estados quânticos (Subero *et al.*, 2023). Para simular esses efeitos, o algoritmo utiliza a equação de flutuação térmica de Nyquist-Johnson, que descreve a densidade espectral de ruído térmico em um resistor (5):

$$S_v(f) = 4k_B T R \quad (5)$$

Onde $S_v(f)$ é a densidade espectral de ruído térmico de tensão, k_B é a constante de Boltzmann ($1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K), T é a temperatura absoluta e R é a resistência do material. A equação (5) possibilita a quantificação do ruído térmico em sistemas quânticos, já que o aumento da temperatura, induz ao aumento da energia térmica disponível para excitações, o que pode levar a flutuações na tensão e na corrente, reduzindo a coerência dos qubits.

Em um ambiente de alta temperatura, o ruído térmico aumenta, reduzindo a coerência do qubit. Este ruído foi modelado utilizando a flutuação térmica e a dissipação de energia, o que permitiu estimar a quantidade de energia dissipada devido ao aumento da temperatura.

Além do ruído térmico, outro tipo de interferência que foi considerado no modelo foi o ruído de corrente. O ruído de corrente é causado por flutuações na corrente elétrica que circula pelo sistema quântico e pode influenciar diretamente os tempos de decoerência. Para modelar esse tipo de interferência, o código incorporou a resistividade do material, a qual determina a facilidade com que a corrente é dissipada (Kaap *et al.*, 2024).

A determinação do ruído de corrente é possível por meio da equação de Nyquist-Johnson (Garden, 2024), adaptada para se considerar a corrente (I), é obtida considerando a lei de Ohm, onde sabe-se que V é o ruído de tensão e $I = \frac{V}{R}$ é o ruído de corrente, logo, $S_I(f)$, que é a densidade espectral de ruído de corrente, pode ser obtida por (7):

$$S_I(f) = \frac{S_v(f)}{R^2} \quad (7)$$

Logo, tem-se, ao substituir $S_v(f)$ (8):

$$S_I(f) = \frac{4k_B T}{R^2} \quad (8)$$

No caso de materiais como o YBCO e grafeno, que são mais suscetíveis a esse tipo de ruído.

O ruído magnético também foi considerado no modelo. Esse ruído é causado por flutuações no campo magnético que podem interferir na evolução dos estados quânticos. Para os materiais supercondutores, o campo magnético afeta diretamente os níveis de energia dos qubits, causando deslocamentos que levam à perda de coerência. O modelo incorporou esse fator por meio de uma análise da permeabilidade magnética do material, um parâmetro que descreve a facilidade com que um material responde a um campo magnético externo (Kim *et al.*, 2024).

O modelo proposto considerou que em um sistema magnético, as flutuações no campo magnético $B(t)$ podem ser relacionadas à agitação térmica dos momentos magnéticos. A energia térmica $k_B T$ fornece energia para excitar os momentos magnéticos, causando flutuações no campo magnético. Desta forma, a densidade espectral de ruído magnético $S_B(f)$ é proporcional à energia térmica $k_B T$ e inversamente proporcional à frequência (f). Assim, considerando a constante de proporcionalidade envolve a permeabilidade magnética do vácuo (μ_0), que é uma propriedade fundamental do espaço livre, tem-se (9):

$$S_B(f) = \frac{2\mu_0 k_B T}{\pi^2 f} \quad (9)$$

Os materiais de alta permeabilidade magnética, como o YBCO, tendem a ser mais sensíveis a esse tipo de interferência, o que reflete na redução da estabilidade do qubit.

O fator de material ajustado (α) é uma medida da eficiência relativa de um material em manter a coerência quântica (T_2) em um qubit transmon. Ele é determinado pelas propriedades físicas do material, ou seja, dissipação de energia, ruídos térmico, de corrente e magnético e impurezas (Qi *et al.*, 2025). O cálculo é definido em (10):

$$\alpha = \frac{1}{\eta} \quad (10)$$

Onde η é a suscetibilidade total à decoerência, definida como (11):

$$\eta = \gamma + S_v(f) + S_I(f) + S_B(f) + \varepsilon \quad (11)$$

Onde γ é a dissipação de energia, proporcional à resistividade do material e à temperatura e ε é a concentração de impurezas ou irregularidades no compósito, sendo que, quanto maior o nível de ε , maior a decoerência.

A partir disso, determinou-se os níveis de ruído de 0,8 para o Nióbio, 0,6 para o YBCO e 0,5 para o Grafeno.

O algoritmo foi desenvolvido em uma sequência de etapas de forma a simular o comportamento de materiais supercondutores em junções Josephson, com foco nos tempos de coerência qubits transmon. A execução começa com a definição das variáveis temperatura, tensão aplicada e tipo de material, que podem ser alteradas no código, de forma a se observar diferentes situações. Com base nesses parâmetros, o código calcula as propriedades físicas dos materiais. A cada material, é atribuído um fator de material ajustado, que reflete suas características específicas em relação à decoerência. Para cada tipo de material (Nióbio, HTS, materiais exóticos), o tempo de decoerência é então determinado, utilizando um modelo empírico que considera a dissipação de energia e os efeitos de ruídos térmicos e magnéticos, ajustando os cálculos conforme as condições de operação.

A próxima etapa envolve a determinação do tempo de coerência, que é deduzido com base nas interações internas do qubit e nas flutuações do ambiente. Esse tempo é ajustado de acordo com os parâmetros do material e os efeitos térmicos. O algoritmo simula a evolução desses tempos para diferentes condições de temperatura e tensão, permitindo uma análise detalhada de como essas variáveis impactam o desempenho do sistema quântico.

Nesta simulação, o algoritmo desenvolvido empregou as temperaturas de 1K, 4K, 10K e 77K porque essas temperaturas são relevantes na fenomenologia dos supercondutores e refletem condições reais de operação de materiais como o Nióbio (Nb) e o YBCO (supercondutores de alta temperatura) (Krylov; Friedman, 2024).

A temperatura de 1 K foi escolhida para simular condições próximas ao zero absoluto, situação na qual materiais exóticos, como grafeno, podem exibir propriedades supercondutoras em condições específicas de pressão ou dopagem. A temperatura de 4 K foi selecionada porque é a temperatura de uso de hélio líquido como fluido refrigerante. O hélio líquido é utilizado na refrigeração de alguns sistemas de computadores quânticos, para manter os qubits transmon em temperaturas próximas a 4 K, garantindo que o material opere no regime supercondutor. A temperatura de 10 K foi escolhida para explorar o comportamento do Nióbio em situação próxima de sua temperatura crítica (9,2 K), permitindo a análise do efeito da temperatura na resistividade e na decoerência. Por fim, a temperatura de 77 K é a temperatura de ebulição do

nitrogênio líquido, uma condição utilizada em experimentos com supercondutores de alta temperatura, como o YBCO, cuja temperatura crítica é de cerca de 90 K.

Além disso, o algoritmo empregou as tensões de 0,01V, 0,1V e 1,0V porque essas tensões são valores típicos usados em simulações (Pita-Vidal *et al.*, 2023) com qubits transmon para se determinar a influência da tensão no tempo de coerência (T_2). A tensão aplicada à junção Josephson influencia diretamente o regime de operação do sistema, seja no regime de corrente contínua (*DC Josephson effect*) ou no regime de corrente alternada (*AC Josephson effect*).

A tensão de 0,01 V foi escolhida para simular condições próximas ao regime de corrente contínua, no qual a corrente através da junção, é proporcional ao fluxo magnético quântico. Já as tensões de 0,1 V e 1,0 V foram selecionadas para explorar o regime de corrente alternada, no qual tensões mais altas induzem oscilações de corrente mais intensas, aumentando a energia dissipada no sistema e, conseqüentemente, a decoerência.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O algoritmo desenvolvido para a simulação dos tempos de coerência (T_2) dos materiais supercondutores em junções Josephson se mostrou adequado para o objetivo proposto, apresentando resultados que seguem a tendência esperada de acordo com a literatura. A utilização do ambiente Jupyter Notebook e da biblioteca NumPy permitiu o adequado desenvolvimento, possibilitando a implementação das operações associadas aos fenômenos físicos retratados. A adequação dos resultados foi verificada por meio da comparação com dados empíricos e modelos teóricos existentes.

No entanto, o algoritmo apresenta restrições e pode ser aprimorado em algumas áreas. A implementação atual assume um modelo simplificado de decoerência, que não leva em consideração algumas interações subatômicas mais complexas que podem influenciar o comportamento de materiais em condições extremas, como as flutuações quânticas e as interações de spin em alta temperatura. Além disso, os parâmetros ajustados para cada material, como o fator de decoerência, foram baseados em valores típicos encontrados na literatura, mas podem variar dependendo das condições experimentais específicas. A inserção de modelos mais detalhados para a interação entre partículas e a consideração de mais variáveis de ruído poderia aumentar a precisão e a abrangência da simulação. A Figura 2 apresenta o resultado da simulação na plataforma Jupyter Notebook.

Figura 2 - Resultados da simulação

Tabela de Tempo de Coerência (T2) para Tensão = 0.01 V					
Material	1 K	4 K	10 K	77 K	

Nióbio (Nb)	7.54e-07		7.77e-07	8.25e-07	1.61e-06
YBCO (HTS)	5.60e-07		5.77e-07	6.12e-07	1.20e-06
Grafeno (Exótico)		4.78e-07	4.93e-07	5.23e-07	1.02e-06

Tabela de Tempo de Coerência (T2) para Tensão = 0.1 V					
Material	1 K	4 K	10 K	77 K	

Nióbio (Nb)	4.80e-07		4.95e-07	5.26e-07	1.03e-06
YBCO (HTS)	3.57e-07		3.68e-07	3.90e-07	7.63e-07
Grafeno (Exótico)		3.05e-07	3.14e-07	3.33e-07	6.52e-07

Tabela de Tempo de Coerência (T2) para Tensão = 1.0 V					
Material	1 K	4 K	10 K	77 K	

Nióbio (Nb)	5.34e-09		5.50e-09	5.84e-09	1.14e-08
YBCO (HTS)	3.96e-09		4.09e-09	4.34e-09	8.48e-09
Grafeno (Exótico)		3.39e-09	3.49e-09	3.70e-09	7.24e-09

Fonte: os autores (2024).

Os resultados obtidos na simulação de tempo de coerência (T_2) para diferentes tensões e temperaturas mostram comportamentos esperados para os materiais supercondutores analisados, com destaque para o Nióbio (Nb), que apresenta os maiores tempos de coerência em todas as condições. Este comportamento está em conformidade com a literatura existente sobre o desempenho de materiais supercondutores em sistemas quânticos. O Nióbio é amplamente utilizado em qubits transmon devido à sua alta qualidade de supercondutividade e baixa dissipação de energia, características que resultam em menores taxas de decoerência. Estudos, como (Bal *et al.*, 2024), indicam que o Nióbio é uma alternativa promissora para o desenvolvimento de junções Josephson, com tempos de coerência que variam de 7.54e-07 s a 1.61e-06 s para a tensão de 0.01 V.

Em contraste, o YBCO (HTS) mostrou tempos de coerência menores do que o Nióbio, especialmente em temperaturas mais altas. Para a tensão de 0.01 V, os tempos de coerência do YBCO variaram de 5.60e-07 s a 1.20e-06 s, o que é consistente com as estimativas para supercondutores de alta temperatura (Ezraty, 2023). Embora o YBCO seja vantajoso para operar a temperaturas mais elevadas (acima de 77 K), ele apresenta um desempenho inferior em relação ao Nióbio, devido à maior suscetibilidade à decoerência. Martinis *et al.* (2005) discutem que materiais HTS, embora funcionem em temperaturas mais altas, enfrentam maiores desafios em relação à decoerência, resultante das flutuações quânticas e do aumento do ruído ambiente. A redução dos tempos de coerência observada para o YBCO confirma esses achados,

mostrando um desempenho superior apenas nas condições de temperatura baixa, mas com quedas acentuadas conforme a temperatura aumenta.

O Grafeno, escolhido como material exótico para essa simulação, apresentou os menores tempos de coerência, o que está em consonância com o previsto pela literatura sobre as limitações desse material em sistemas quânticos (Rodan Legrain *et al.*, 2024). Para a tensão de 0.01 V, o Grafeno exibiu tempos de coerência variando de 4.78×10^{-7} s a 1.02×10^{-6} s, valores consideravelmente menores do que os do Nióbio e do YBCO. Apesar de o Grafeno possuir características eletrônicas relevantes, como alta mobilidade de carga e condutividade, ele é mais suscetível a ruídos e flutuações térmicas, que aceleram a decoerência. A literatura, como o estudo de Dattatraya *et al.* (2012), destaca que o Grafeno é muito sensível a interferências externas e ao ruído de fundo, o que impacta negativamente seu desempenho em sistemas quânticos. Esses achados são confirmados pelos dados obtidos na simulação, que demonstram uma maior taxa de decoerência para o Grafeno em comparação com os outros materiais.

A análise dos tempos de coerência em função da tensão também revelou que, para a tensão de 1.0 V, por exemplo, o Nióbio apresentou uma redução significativa nos tempos de coerência, variando de 5.34×10^{-9} s a 1.14×10^{-8} s. A literatura (Bond, 2023) sugere que o aumento da tensão leva ao aumento dos efeitos de decoerência devido ao maior campo elétrico e dissipação de energia, o que é confirmado pelos resultados da simulação. Este fenômeno é claramente refletido nos resultados obtidos, no quais a tensão de 1.0 V tem um impacto negativo sobre o Nióbio em comparação com as tensões mais baixas. O YBCO e o Grafeno também mostraram quedas nos tempos de coerência à medida que a tensão aumentava, com o Grafeno sendo mais afetado devido à sua maior suscetibilidade ao ruído.

De uma forma geral, os resultados das simulações confirmam a literatura sobre os supercondutores analisados, com o Nióbio apresentando-se como o material mais eficiente em termos de tempo de coerência, seguido pelo YBCO e pelo Grafeno. Também deve-se considerar que, embora materiais como o YBCO e o Grafeno tenham vantagens em termos de temperatura operacional, eles apresentam restrições relacionadas aos ruídos, o que, até o momento, limita seu uso em sistemas quânticos mais estáveis. A continuidade dos estudos deve focar na melhoria das características de decoerência desses materiais, particularmente em condições de alta tensão.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este estudo teve como objetivo avaliar os tempos de coerência (T_2) dos materiais supercondutores Nióbio, YBCO (supercondutores de alta temperatura) e Grafeno, em condições de variação de temperatura e tensão, utilizando um modelo computacional desenvolvido em Python. O modelo permitiu simular os efeitos de decoerência em função de parâmetros elétricos e térmicos, trazendo informações sobre o desempenho desses materiais em sistemas quânticos, baseados em qubits transmon. Os resultados obtidos corroboram a literatura existente, mostrando o Nióbio como o material mais estável em termos de tempo de coerência, seguido pelo YBCO e Grafeno, que apresentaram desempenho inferior.

Apesar da precisão dos resultados e da coerência com as tendências observadas em estudos prévios, o modelo possui algumas limitações. A simulação foi baseada em simplificações dos comportamentos físicos dos materiais, e não levou em consideração fatores como variações ambientais mais complexas ou interações quânticas não tratadas de forma mais detalhada. Além disso, a influência de parâmetros como o campo magnético ou a geometria específica dos qubits transmon não foi incorporada em sua complexidade, o que pode afetar a validade dos resultados em cenários menos reducionistas.

O estudo também indicou que a escolha do material para qubits transmon é determinante para a performance de sistemas que exigem alta fidelidade e baixos níveis de decoerência. O Nióbio se apresentou como o material mais adequado para essas condições, mas os supercondutores de alta temperatura, como o YBCO, ainda são possibilidades a serem consideradas, devido à sua capacidade de operar em temperaturas mais altas. Já o Grafeno, apesar de suas qualidades eletrônicas, mostrou-se mais suscetível à decoerência que os demais, limitando sua aplicabilidade em sistemas quânticos.

Futuros estudos podem se concentrar em melhorar os modelos computacionais, incorporando mais variáveis e características específicas de cada material, que podem afetar o desempenho quântico. A consideração de mais materiais exóticos e a análise de outros tipos de qubits, como aqueles baseados em supercondutores topológicos ou materiais híbridos, também são áreas promissoras. Além disso, a adaptação do modelo para simular condições com maior nível de detalhamento pode ampliar a aplicabilidade dos resultados.

Referências

BAUMANN, J., SHI, Y., WEERAKONDA, D., DURRELL, J. H., CARDWELL, D. A. Understanding the porosity and its effects on the superconducting properties of YBCO single grains. **Journal of the European Ceramic Society**, v. 43, n. 4, p. 1542-1547, 2023.

BAL, M., MURTHY, A. A., ZHU, S., CRISA, F., YOU, X., HUANG, Z., GRASSELLINO, A. Systematic improvements in transmon qubit coherence enabled by niobium surface encapsulation. *npj Quantum Information*, v. 10, n. 1, p. 43, 2024.

BOND, E. The contribution of coherence field theory to a model of consciousness: electric currents, EM fields, and EM radiation in the brain. *Frontiers in Human Neuroscience*, v. 16, p. 1020105, 2023.

CHANDRASEKHAR, V. Current dependence of the low bias resistance of small capacitance Josephson junctions. *Physics Letters A*, v. 507, p. 129493, 2024.

CHEN, S., PARK, S., VOOL, U., MAKSIMOVIC, N., BROADWAY, D. A., FLAKS, M., YACOBY, A. Current induced hidden states in Josephson junctions. *Nature Communications*, v. 15, n. 1, p. 8059, 2024.

CHOW, C. C., AINSLIE, M. D., CHAU, K. T. High temperature superconducting rotating electrical machines: An overview. *Energy Reports*, v. 9, p. 1124-1156, 2023.

COOMBS, T. A., WANG, Q., SHAH, A., HU, J., HAO, L., PATEL, I., WANG, W. High-temperature superconductors and their large-scale applications. *Nature Reviews Electrical Engineering*, p. 1-14, 2024.

DUDEK, E.; MOSIĄDZ, M. Wzorce jednostek miar rezystancji i napięcia elektrycznego a podstawowe stałe fizyczne. *Pomiary Automatyka Kontrola*, v. 53, n. 9 bis, p. 82-85, 2007.

EREMETS, M. I. The current status and future development of high-temperature conventional superconductivity. *National Science Review*, v. 11, n. 7, 2024.

EZRATTY, O. Perspective on superconducting qubit quantum computing. *The European Physical Journal A*, v. 59, n. 5, p. 94, 2023.

GARDEN, J. L. Fluctuations of thermal variables investigated by cross-correlation function. *Physical Review E*, v. 110, n. 1, p. 014103, 2024.

GENOT, C., LÉCREVISSE, T., FAZILLEAU, P., TIXADOR, P. Experimental measurements of contact resistivity between superconducting HTS tapes with or without metallic co-wound tape. *Cryogenics*, v. 132, p. 103691, 2023.

GERMANESE, G., PAOLUCCI, F., MARCHEGANI, G., BRAGGIO, A., GIAZOTTO, F. Phase control of bipolar thermoelectricity in josephson tunnel junctions. *Physical Review Applied*, v. 19, n. 1, p. 014074, 2023.

GREENAWAY, S., SMITH, A., MINTERT, F., MALZ, D. Analogue Quantum Simulation with Fixed-Frequency Transmon Qubits. *Quantum*, v. 8, p. 1263, 2024.

HEUNISCH, L., EICHLER, C., HARTMANN, M. J. Tunable coupler to fully decouple and maximally localize superconducting qubits. *Physical Review Applied*, v. 20, n. 6, p. 064037, 2023.

KIM, S., ABDURAKHIMOV, L. V., PHAM, D., QIU, W., TERA, H., ASHHAB, S., SEMBA, K. Superconducting flux qubit with ferromagnetic Josephson π -junction operating at zero magnetic field. *Communications Materials*, v. 5, n. 1, p. 216, 2024.

KAAP, F., KISSLING, C., GAYDAMACHENKO, V., GRÜNHaupt, L., LOTKHOV, S. Demonstration of dual Shapiro steps in small Josephson junctions. *Nature Communications*, v. 15, n. 1, p. 8726, 2024.

KOBYLYSHKA, M. R., PŮST, L., CHANG, C. S., HAUET, T., KOBYLYSHKA-VE NEVA, A. The paramagnetic Meissner effect (PME) in metallic superconductors. **Metals**, v. 13, n. 6, p. 1140, 2023.

KRYLOV, G., FRIEDMAN, E. G. Single Flux Quantum Integrated Circuit Design. **Springer International PU**, 2024.

LEVIN, H., HAIM, A., HUNG, J. S., ALIDOUST, N., KALAEI, M., DELORENZO, L., PAINTER, O. Demonstrating a long-coherence dual-rail erasure qubit using tunable transmons. **Physical Review X**, v. 14, n. 1, p. 011051, 2024.

MATSUO, S., IMOTO, T., YOKOYAMA, T., SATO, Y., LINDEMANN, T., GRONIN, S., TARUCHA, S. Engineering of anomalous Josephson effect in coherently coupled Josephson junctions. **arXiv preprint** arXiv:2305.06596, 2023.

PANGBURN, E., HAURIE, L., CRÉPIEUX, A., AWOGA, O. A., BLACK-SCHAFER, A. M., PÉPIN, C., BENA, C. Superconductivity in monolayer and few-layer graphene. I. Review of possible pairing symmetries and basic electronic properties. **Physical Review B**, v. 108, n. 13, p. 134514, 2023.

PEZZÈ, L., XHANI, K., DAIX, C., GRANI, N., DONELLI, B., SCAZZA, F., ROATI, G. Stabilizing persistent currents in an atomtronic Josephson junction necklace. **Nature Communications**, v. 15, n. 1, p. 4831, 2024.

PITA-VIDAL, M., BARGERBOS, A., ŽITKO, R., SPLITTHOFF, L. J., GRÜNHaupt, L., WESDORP, J. J., ANDERSEN, C. K. Direct manipulation of a superconducting spin qubit strongly coupled to a transmon qubit. **Nature Physics**, v. 19, n. 8, p. 1110-1115, 2023.

QI, J., CHEN, C. Z., SONG, J., LIU, J., HE, K., SUN, Q. F., XIE, X. C. Edge supercurrent in Josephson junctions based on topological materials. **Science China Physics, Mechanics & Astronomy**, v. 68, n. 2, p. 227401, 2025.

RICE, J. H., MALLET, B. P., MOSELEY, D. A., PETROV, A., ZHANG, H., WRAY, S., BADCOCK, R. A. A full-wave HTS flux pump using a feedback control system. **Superconductivity**, v. 8, p. 100064, 2023.

RODAN LEGRain, D., WANG, J., MERCADER-PÉREZ, P., ASSOULY, R., HAYS, M., GOSWAMI, A., OLIVER, W. Optimized Backgate Design for Enhancing Coherence Times in Graphene Gatemons. **Bulletin of the American Physical Society**, 2024.

SAGI, O., CRIPPA, A., VALENTINI, M., JANIK, M., BAGHUMYAN, L., FABRIS, G., KATSAROS, G. A gate tunable transmon qubit in planar Ge. **Nature Communications**, v. 15, n. 1, p. 6400, 2024.

SHAICHAIDAROV, R. S., KIM, K. H., DUNSTAN, J., ANTONOV, I., GOLUBEV, D., ANTONOV, V. N., ASTAFIEV, O. V. Quantized current steps due to the synchronization of microwaves with Bloch oscillations in small Josephson junctions. **Nature Communications**, v. 15, n. 1, p. 9326, 2024.

SUBERO, D., MAILLET, O., GOLUBEV, D. S., THOMAS, G., PELTONEN, J. T., KARIMI, B., PEKOLA, J. P. Bolometric detection of Josephson inductance in a highly resistive environment. **Nature Communications**, v. 14, n. 1, p. 7924, 2023.

TRIPATHI, V., CHEN, H., LEVENSON-FALK, E., LIDAR, D. A. Modeling low-and high-frequency noise in transmon qubits with resource-efficient measurement. **PRX Quantum**, v. 5, n. 1, p. 010320, 2024.

VIRTANEN, P., HEIKKILÄ, T. T. Nonreciprocal Josephson linear response. **Physical Review Letters**, v. 132, n. 4, p. 046002, 2024.

WILLSCH, D., RIEGER, D., WINKEL, P., WILLSCH, M., DICKEL, C., KRAUSE, J., POP, I. M. Observation of Josephson harmonics in tunnel junctions. **Nature Physics**, p. 1-7, 2024.

ZAREA, M., UEKI, H., SAULS, J. A. Effects of anisotropy and disorder on the superconducting properties of niobium. **Frontiers in Physics**, v. 11, p. 1269872, 2023.