



Caio M.  
Porto



Matheus S.  
Fonseca



Guilherme de  
S. T. Morais



Celso J.  
Villas-Boas



Rene A.  
Nome



Nelson H.  
Morgon

O artigo selecionado para capa nesta edição é do grupo do Prof. Nelson H. Morgon da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. A arte da capa ilustra um *chip* de um computador quântico contendo um qubit que está em superposição e sistemas químicos, tanto os que já foram tratados quanto os que são de vislumbra-se poder-se tratar no futuro. Veja o artigo na íntera em <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20250072>.

#### Qual é a principal contribuição deste artigo?

O trabalho apresenta a computação quântica, que deverá trazer uma revolução ao campo da química teórica e computacional. Primeiramente, ele fornece *insights* valiosos sobre o desenvolvimento histórico da química computacional e da computação quântica, destacando marcos e avanços importantes nesses campos interconectados. Para isso, faz uma recapitulação do desenvolvimento da computação clássica e sua interação com a química computacional, do seu início até a última década. Descreve da mesma forma a linha do tempo da computação quântica, bem como o crescente investimento mundial nessa área.

Em seguida, aborda os desafios atuais na computação quântica, como a estabilidade dos qubits e a mitigação de erros, que são cruciais para sua aplicação na química computacional, cuja solução seria o caminho para se ultrapassar a era conhecida como computação quântica de escala intermediária e ruidosa (NISQ). Posteriormente, discute algoritmos como o *variational quantum eigensolver* (VQE), suas aplicações e desafios.

Finalmente, o estudo investiga especificamente a superfície de energia potencial (PES) da molécula de H<sub>2</sub> e He<sub>2</sub> através do método

VQE no nível de teoria CCSD/STO-3G, sua excelente concordância, na ausência de decoerência, com cálculos em computadores clássicos obtidos através da diagonalização da matriz do ansatz, no mesmo nível de teoria.

Dessa forma, o trabalho é uma introdução relevante da computação quântica, sua importância e uso na química teórica e computacional, assim como a utilização do principal algoritmo para cálculos de estrutura eletrônica.

#### Como foi idealizada a arte da capa?

A arte foi idealizada de forma a evocar o conceito de *chip*, quântica, superposição adicionado a moléculas e sistemas que são facilmente reconhecíveis na química, devido a sua importância nesta, desde bioquímica até química de materiais.

#### Como a ideia desta revisão surgiu?

A ideia surgiu com o crescente aumento da importância da computação quântica, da qualidade do *hardware* de computadores quânticos e na necessidade de um trabalho relevante que pudesse introduzir o campo da computação quântica de forma abrangente e profunda simultaneamente.

#### Quais são as perspectivas futuras para a linha de pesquisa?

Temos como perspectiva contribuir desenvolvendo e aplicando algoritmos para computadores quânticos, estudar a sua complexidade computacional, possíveis aplicações em aprendizagem de máquina e aplicações para cálculo de estrutura eletrônica de moléculas maiores.