ALEXANDRE COUTINHO LISBOA
Controle Quântico Ótimo: Fundamentos, Aplicações e Extensões da Teoria
Tese apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Engenharia Elétrica

ALEXANDRE COUTINHO LISBOA

Controle Quântico Ótimo: Fundamentos, Aplicações e Extensões da Teoria

Tese apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Engenharia Elétrica

Área de Concentração: Engenharia de Sistemas

Orientador:

Prof. Dr. José Roberto Castilho Piqueira

Catalogação-na-publicação

Lisboa, Alexandre Coutinho

Controle quântico ótimo: fundamentos, aplicações e extensões da teoria / A.C. Lisboa. -- São Paulo, 2015. 263 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle.

1.Mecânica quântica (Controle) 2.Teoria de sistemas e controle) 3.Informção quântica 4.Controle ótimo I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle II.t.

À minha mãe, Marta, e ao meu pai, Luiz Antônio (*in memoriam*), dedico esta Tese.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, o Prof. Dr. José Roberto Castilho Piqueira, por sua destacada dedicação, notória paciência, pelo zelo e pela diligência ao longo de toda orientação de Doutorado. Serei eternamente grato pelo enorme privilégio de tê-lo conhecido, de ter sido seu aluno e por poder interagir com esse notável Docente e Pesquisador, a começar pela Graduação, passando pelo Mestrado e, finalmente, no Doutorado. Seu grande e contagiante interesse por diversas áreas científicas e pelos estudos interdisciplinares, seu apreço pelo rigor teórico e matemático e sua excelência pedagógica exerceram influências indeléveis em minhas buscas e idiossincrasias acadêmicas. Creio que ele desconheça esse fato, mas minha paixão pela Física, bem como minha decisão de cursar Engenharia Elétrica, foram, em grande medida, fomentadas e catalisadas pela leitura e pelo estudo de seu material didático de Eletricidade e Magnetismo, por ocasião em que eu era estudante de terceiro ano integrado, de um curso pré-vestibular. Assim, completa-se, com este Trabalho, um ciclo iniciado há duas décadas atrás. Em suma, valho-me, aqui, das sábias palavras do acadêmico, jornalista e educador estadunidense, Henry B. Adams: "Um professor afeta a eternidade; é impossível dizer até onde vai sua influência".

Aos Professores das disciplinas de Doutorado que cursei, Prof. José Roberto Castilho Piqueira, Prof. Carlos Corrêa Filho, Prof. José Aquiles Baesso Grimoni, Prof. Osvaldo Shigueru Nakao, Prof. João Francisco Justo Filho e Prof. Luiz Henrique Alves Monteiro, pelos valiosos conhecimentos transmitidos, quer sejam eles estritamente relacionados às suas disciplinas, notadamente marcadas pelo caráter interdisciplinar, quer fossem extra-curriculares. Em especial, sou grato ao caríssimo Prof. Luiz, que foi meu orientador de Mestrado, por incentivar-me a perseguir a presente linha de pesquisa no Doutorado, completamente distinta da linha anterior, mesmo sendo ele não muito afeito ao "jogar de dados cósmico".

Aos Professores Felipe M. Pait e Fuad Kassab Jr., do Laboratório de Automação e Controle, os quais gentilmente acolheram o convite para tomar parte da banca do Exame de Qualificação. Seus conselhos, incentivos e estímulos, bem como a crença no potencial deste Trabalho, foram-me inestimáveis.

À minha mãe, Marta, e à minha irmã, Alessandra, minhas mais importantes referências existenciais. Pela nobreza de espírito, pelo caráter magnânimo, pelos valores sublimes em mim incutidos, pela amizade, e pelo apoio irrestrito ao longo dos anos de vida acadêmica. Minha gratidão a elas é incomensurável.

À Janaína, por seu amor sincero e incondicional, pela paciência e motivação inquebrantáveis e constantes ao longo desses dois últimos anos. Se a interpretação de H. Everett ("Many-Worlds Interpretation") da Mecânica Quântica estiver correta, sou imensamente grato, então, por viver neste universo em particular, o qual, dentre as infinitas possibilidades resultantes de infinitas transições de estados quânticos, possibilitou que eu a conhecesse.

Aos meus irmãos politécnicos, Douglas Slaughter e Christian Slaughter, pela longa e inabalável amizade, que remonta aos tempos de graduação. Por seus incentivos, sábios conselhos, pelo frutífero e estimulante intercâmbio de conhecimentos e por nossas muitas e memoráveis "discussões acadêmico-etílico-existenciais".

A meus parentes e familiares, em especial, meus primos Renato, Luiz Ernesto, Ronaldo, José Marcos, Salete, José D'Ângelo e Cida; ao meu cunhado, Rodrigo; e a vários amigos e pessoas especiais, como Janine, Alexandre, Rose, Peterson, Camila, Ismael, Willian, Claudinho, Carol, Elisa, Cécile, Irmie, Alex, Ricardo, Débora, Akira e Helena. Cada um deles, a seu modo, de forma direta ou indireta, com incentivos e conselhos, contribuiu para que este Doutorado fosse levado a cabo e para que a vida me fosse mais amena e aprazível. Lamentáveis esquecimentos são inevitáveis, de modo que peço minhas devidas desculpas a quem não foi aqui citado, ressaltando que, não obstante tal ato falho, vocês estão presentes em minha mente.

À CAPES, por fim, agradeço o apoio financeiro, que viabilizou o Programa de Doutorado.

"Wahrscheinlich darf man ganz allgemein sagen, daß sich in der Geschichte des menschlichen Denkens oft die fruchtbarsten Entwicklungen dort ergeben haben, wo zwei verschiedene Arten des Denkens sich getroffen haben. Diese verschiedenen Arten des Denkens mögen ihre Wurzeln in verschiedenen Gebieten der menschlichen Kultur haben, oder in verschiedenen Zeiten, in verschiedenen kulturellen Umgebungen, oder verschiedenen religiösen Traditionen. Wenn sie sich nur wirklich treffen, das heißt, wenn sie wenigstens so weit zueinander in Beziehung treten, daß eine echte Wechselwirkung stattfindet, dann kann man darauf hoffen, daß neue und interessante Entwicklungen folgen."

Werner Heisenberg - "Physik und Philosophie"

"Omnia disce, videbis postea nihil esse superfluum. Coarctata scientia iucunda non est."

Hugh of Saint Victor - "Didascalicon VI"

RESUMO

Inicialmente, os conceitos fundamentais e a problemática básica subjacentes ao Controle de Sistemas Quânticos são apresentados, destacando-se, por exemplo, as questões físicas e dinâmicas envolvidas, os principais tipos e metodologias de controle no contexto quântico, bem como aplicações existentes e potenciais de Controle Quântico, muitas das quais situando-se na vanguarda da Ciência e da Tecnologia. Segue-se uma exposição do arcabouço teórico básico e do formalismo padrão da Mecânica Quântica, tendo em vista prover os elementos necessários à compreensão de sistemas quânticos, sua dinâmica e seu controle. O conceito de Controlabilidade é, então, apresentado no contexto de Sistemas Quânticos. Em seqüência, os fundamentos do Controle Quântico Ótimo são desenvolvidos como uma extensão da Teoria Clássica de Controle Ótimo, apresentando-se exemplos de aplicações. Ao problema da transferência de estados quânticos para um estado-alvo em tempo mínimo é devotada especial atenção, dada sua grande relevância em aplicações tecnológicas de ponta, como em Computação Quântica e Processamento de Informação Quântica. A partir de limitações físicas que são inerentes a qualquer sistema quântico, no tocante ao tempo mínimo necessário para que ocorra uma transição de estados, propõem-se Fatores de Mérito para quantificar a eficiência dos controles quânticos ótimos que minimizam o tempo de transferência de estados. Exemplos de aplicação, estudos teóricos e estudos de casos são levados a cabo para a definição dos Fatores de Mérito associados. Este trabalho termina com estudos relativos a uma possível formulação da Teoria de Controle Quântico Ótimo em termos de Integrais de Trajetória para o tratamento de sistemas quânticos contínuos, em especial, o controle espaço-temporal de partículas quânticas. Um possível emprego do Efeito Aharonov-Bohm é também discutido como estratégia de Controle Quântico.

Palavras-chave: Mecânica Quântica. Controle Quântico. Controle Ótimo. Informação Quântica. Quantização.

ABSTRACT

Firstly, the fundamental concepts and the basic issues concerning the Control of Quantum Systems are presented, highlighting, for example, related physical and dynamical questions, the main control types and methodologies in the quantum context, as well as current and potential applications of Quantum Control, many of them situated on the avant-garde of Science and Technology. Then follows an exposition of the basic theoretical framework and the standard formalism of Quantum Mechanics, whose aim is to provide the necessary elements for understanding quantum systems, quantum dynamics and control. The concept of Controlability is then presented in the context of Quantum Systems. Subsequently, the fundamental concepts of Quantum Optimal Control are developed as an extension of the Classical Optimal Control Theory, featuring some examples of application. To the problem of transfering quantum states to a certain target state at minimal time a special attention is devoted, having in mind its great relevance in state-of-art technological applications, e.g., Quantum Computation and Quantum Information Processing. From physical limitations that are inherent to any quantum systems, regarding the minimal time necessary to perform a state transition, one proposes Figures of Merit in order to quantify the efficiency of optimal quantum controls which minimize the state transfer time. Examples of applications, theoretical studies and case studies are carried out in order to define the associated Figures of Merit. This work ends with studies concerning a possible formulation of Optimal Quantum Control Theory in terms of Path Integrals for handling continuous quantum systems, particularly, the space-time control of quantum particles. A possible use of the Aharonov-Bohm Effect is also discussed as a Quantum Control strategy.

Keywords: Quantum Mechanics. Quantum Control. Optimal Control. Quantum Information. Quantization.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	15
1 REVISÃO DA LITERATURA	25
2 FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	30
2.1 CONDIREAÇÕES MATEMÁTICAS PRELIMINARES	31
2.2 NOTAÇÃO DE DIRAC NA MECÂNICA QUÂNTICA	34
2.2.1 Estados	34
2.2.2 Observáveis e Expansões de Estado	36
2.2.3 Representações Matriciais de Observáveis e de Estados	40
2.3 MEDIDAS E PROBABILIDADES ASSOCIADAS	44
2.4 OBSERVÁVEIS INCOMPATÍVEIS E RELAÇÕES DE INCERTEZA	47
2.5 ESPECTRO CONTÍNUO DE AUTOVALORES	51
2.5.1 Caso Unidimensional. Autoestados e Medidas de Posição e Momento	51
2.5.2 Caso Tridimensional. Autoestados e Medidas de Posição e Momento	61
2.6 INTRODUÇÃO À DINÂMICA QUÂNTICA	63

2.6.1 Dinâmica Quântica na Representação de Schrödinger63
2.6.2 Dinâmica na Representação de Heisenberg71
2.6.3 Formulação da Dinâmica Quântica através de Integrais de Trajetória76
3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DE CONTROLE QUÂNTICO82
4 CONTROLABILIDADE DE UM SISTEMA QUÂNTICO86
4.1 INTRODUÇÃO86
4.2 GRUPOS E ÁLGEBRAS DE LIE88
4.3 TESTE DE CONTROLABILIDADE106
4.4 NOÇÕES DE CONTROLABILIDADE PARA O ESTADO QUÂNTICO111
5 CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO116
5.1 FORMULAÇÃO GERAL DO PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO117
5.2 EXTENSÃO PARA SISTEMAS QUÂNTICOS119
5.3 CONDIÇÕES DE OPTIMALIDADE123
5.4 CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO DE TEMPO MÍNIMO140
5.5 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA CONTROLE ÓTIMO DE SISTEMAS QUÂNTICOS149

5.5.1 Introdução149
5.5.2 Métodos que usam Discretização151
5.5.3 Métodos Iterativos152
6 QUANTIFICANDO O DESEMPENHO DE SISTEMAS DE CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO TEMPORAL: TEMPOS MÍNIMOS DE TRANSIÇÕES DE ESTADO E FATORES DE MÉRITO ASSOCIADOS NO CASO DE HAMILTONIANOS INDEPENDENTES DO TEMPO159
6.1 INTRUDUÇÃO159
6.2 TEMPOS MÍNIMOS PARA TRANSIÇÃO DE ESTADOS QUÂNTICOS160
6.3 JUSTIFICATIVAS HEURÍSTICAS E MATEMÁTICAS SOBRE A APROXIMAÇÃO DE HAMILTONIANO INDEPENDENTE DO TEMPO170
6.4 APLICAÇÕES A TRANSIÇÕES DE ESTADO PARTICULARES174
6.5 ESTUDO ANALÍTICO DE CASO: SISTEMA DE FAHRI-GUTMANN176
6.6 APLICAÇÕES A TRANSIÇÕES DE ESTADO ARBITRÁRIAS180
7 QUANTIFICANDO O DESEMPENHO DE SISTEMAS DE CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO TEMPORAL: TEMPOS MÍNIMOS DE TRANSIÇÕES DE ESTADO E FATORES DE MÉRITO ASSOCIADOS NO CASO DE HAMILTONIANOS DEPENDENTES DO TEMPO
7.1 INTRODUÇÃO186

7.2 FORMULAÇÃO TEÓRICA GERAL DO PROBLEMA: PRIMEIRO CASO188	
7.3 ESTUDO ANALÍTICO DE CASO: MODELO DE LANDAU-ZENER191	
7.4 FORMULAÇÃO TEÓRICA GERAL DO PROBLEMA: SEGUNDO CASO196	
7.5 DESENVOLVIMENTOS TEÓRICOS A PARTIR DA ABORDAGEM PROPOSTA POR PFEIFER PARA SISTEMAS QUÂNTICOS COM H = H(t)199	
7.6 A BRAQUISTÓCRONA QUÂNTICA203	
7.6.1 Introdução203	
7.6.2 Princípio de Hamilton e Equações de Euler-Lagrange211	
7.6.3 O Problema Quântico219	
8 INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA DE FEYNMAN E PERSPECTVAS DE EMPREGO EM CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO233	
8.1 INTRODUÇÃO E FORMULAÇÃO DO PROBLEMA233	
8.2 O EFEITO AHARONOV-BOHM E PERSPECTIVAS DE USO EM PROBLEMAS DE CONTROLE DE SISTEMAS QUÂNTICOS235	
9 CONCLUSÕES242	
REFERÊNCIAS244	
APÊNDICE252	

INTRODUÇÃO

A presente Tese abrange como tópicos de interesse as áreas de Mecânica Quântica (não-relativística), com alguma incursão em Mecânica Quântica Relativística e Teoria Quântica de Campos (em especial, a Eletrodinâmica Quântica), e Teorias de Controle Avançado (em especial, Controle Ótimo) e Quântico, procurando, assim, desenvolver uma conexão efetiva entre a Teoria de Controle e a Física Quântica. Temos, pois, como objetivo, trazer à baila este novo, efervescente e promissor campo de pesquisa, notório por seu caráter interdisciplinar, no âmbito da comunidade brasileira de Engenharia de Sistemas e Controle, bem como dar contribuições aos estudos de Engenharia de Sistemas Quânticos.

Há décadas, as teorias e técnicas de controle clássico e avançado têm sido amplamente empregadas, e com sucesso, em uma extensa gama de sistemas macroscópicos, "clássicos", por assim dizer, otimizando processos e fornecendo soluções tecnológicas satisfatórias a problemas oriundos das mais diversas áreas da Engenharia. Não obstante, se é desejado aplicar a Teoria de Controle a sistemas microscópicos, cuja dinâmica não pode ser descrita dentro do arcabouço teórico clássico, fazendo-se necessário, pois, lançar mão de uma descrição quântica, é mister que disponhamos de uma teoria híbrida de Controle, compatível com a Mecânica Quântica e seu formalismo.

Com efeito, se nos sistemas clássicos as medições podem ser efetuadas com um grau arbitrário de precisão, no domínio quântico, as mesmas perturbam os estados quânticos do sistema observado, de modo a definir, pela primeira vez na Física, conforme observado por Dirac em seu monumental tratado (DIRAC, 1958), uma escala não relativa, mas sim absoluta, entre "grande" e "pequeno". Um objeto ou sistema é, destarte, "grande", se a perturbação inflingida pela observação de seu estado dinâmico é desprezível, ao passo que um sistema é "pequeno" quando não é possível observá-lo sem interferência significativa, uma vez que para efetuar uma medição, sempre é

necessário interagir com o sistema em questão, fazendo com que, não apenas o conceito clássico de determinismo, mas também o conceito de causalidade, tenham que ser revistos.

As grandezas observáveis na Mecânica Quântica são representadas por operadores lineares hermiteanos atuando em estados quânticos que evoluem em um espaço de Hilbert, o qual é um espaço vetorial completo, normado, (complexo no contexto da Mecânica Quântica), munido da operação de produto escalar, e que, em geral, não é restrito a dimensões finitas. Os operadores quando não comutam entre si, operadores posição e momento, por exemplo, produzem observações incompatíveis, as quais não podem ter valores bem definidos em nenhum estado quântico, de sorte que as flutuações recíprocas obedecem necessariamente à Relação de Incerteza de Heisenberg, não importando o grau de sofisticação do aparato de medição.

Destarte, uma Teoria de Controle Quântico deve incorporar os princípios da Mecânica Quântica, fazendo com que questões como *Medida*, *Observabilidade* e *Controlabilidade*, ou seja, a possibilidade de direcionamento para estados quânticos desejados, tenham que ser formuladas matematicamente de forma cautelosa e precisa, a fim de propiciar uma teoria satisfatória, a qual se valha de estratégias adequadas de controle em malha aberta e/ou do princípio regulador do *feedback*, que estabiliza, otimiza o desempenho e aumenta a robustez de um sistema, ainda que o mesmo se encontre em um ambiente de incertezas extrínsecas e intrínsecas, como aquelas oriundas da indeterminação no sentido heisenberguiano, mas, principalmente, levandose também em consideração o problema da medida, dentro do contexto quântico. No caso em que o controle é efetuado em malha aberta, a teoria deve garantir a existência e obtenção (a não ser em casos "patológicos") de uma lei de controle igualmente eficiente no tocante à consecução das metas dinâmicas e desempenhos desejados.

Embora haja dificuldades teóricas de grande monta subjacentes à estruturação da Teoria de Controle Quântico, a equação fundamental de evolução dinâmica da Mecânica Quântica, a equação de Schrödinger, preserva não só a normalização da

função de onda ou estado quântico, mas também implica que a derivada temporal do valor esperado do Hamiltoniano seja zero, ou seja, a energia de uma partícula ou sistema é conservada. Também podemos facilmente vislumbrar, ao observar a equação de Schrödinger para uma partícula quântica, que campos externos judiciosamente aplicados podem ser utilizados como esforços de controle:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x,t)\hat{I}\right) |\psi(t)\rangle,$$

em que $|\psi(t)\rangle$ é um estado quântico qualquer que evolui no tempo, com a condição de normalização $||\psi(t)\rangle||=1$, para todo t, \hat{H} o operador hamiltoniano, \hat{p} o operador momento, $\hat{1}$ é o operador identidade e V(x,t) é um potencial, dependente, em geral, do tempo e da(s) coordenada(s) espacial(is).

Sistemas clássicos de controle de dimensão finita são modelados por um sistema de equações diferenciais ordinárias que contém uma ou mais funções dependentes do tempo u(t) - os esforços de controle - a serem escolhidos dentro de um conjunto apropriado de funções. Assim, um sistema genérico de controle tem a forma:

$$\dot{x} = f(x(t), u(t), t) \,,$$

em que x(t) representa o estado do sistema, em geral, variando no tempo dentro de uma certa variedade, e f sendo um campo vetorial. O estado x descreve completamente a dinâmica do sistema considerado, embora, geralmente não seja acessível a um observador externo. Com efeito, apenas uma função (vetorial) de x, y := y(x), dita "saída do sistema", é acessível.

No caso de sistemas quânticos, a equação relevante, descritiva da dinâmica, é a Equação de Schrödinger, de modo que, fazendo o papel de estado do sistema, temos o

vetor $|\psi(t)\rangle$. Assim, em analogia ao sistema dito clássico, pode-se escrever a dinâmica controlada como:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(u(t)) |\psi(t)\rangle.$$

Aqui, o operador hamiltoniano do sistema, $\hat{H}(u(t))$, é função do controle u(t), e continua hermiteano para todo valor de t.

Como H é agora função do(s) u(t), que desempenha(m) o papel de controle(s), a energia do sistema passa a depender também do tempo através dos mesmos; e nesse modelo dependente do tempo, os controles são fisicamente implementados por campos eletromagnéticos, os quais, em muitas aplicações práticas, podem ser feitos constantes no espaço, variando apenas no tempo. Para sistemas quânticos discretos, ou seja, que envolvem grandezas físicas cujo espectro de autovalores é finito, $\hat{H}(u(t))$ é uma matriz (hermiteana), função dos u(t).

Em muitos arranjos experimentais, um campo eletromagnético interage com sistemas quânticos (por exemplo, átomos, núcleos, elétrons...), cuja dinâmica é apropriadamente descrita pela Mecânica Quântica via equação de Schrödinger. Tal campo eletromagnético pode freqüentemente ser tratado como um campo clássico, dando predições que concordam com as observações macroscópicas - os próprios aparatos de medida e detecção são macroscópicos - de modo que dizemos tratar-se nesse caso de uma aproximação semi-clássica. Com o avanço tecnológico das últimas décadas, é possível atualmente ajustar ou moldar esse campo eletromagnético praticamente da forma que se desejar, a fim de obter a consecução de uma dada meta de controle, que, em termos de Controle Quântico, trata-se de efetuar transferências de estado desejadas no sistema de interesse.

Intrinsecamente ligado à problemática das transferências de estado possíveis, está o conceito de *Controlabilidade*, que diz respeito ao conjunto \Re de estados

alcançáveis mediante à variação de esforços de controle u(t). Essa questão pode ser respondida valendo-se da Teoria de Grupos e Álgebras de Lie, uma vez que o conjunto de estados alcançáveis \Re pode ser caracterizado pelo Grupo de Lie, com estrutura diferenciável, correspondente à Álgebra de Lie gerada pelos operadores $\hat{H}(u(t))$, quando u(t) varia dentro do conjunto dos possíveis valores para os controles (SCHIRMER *et al.*, 2002) (ALBERTINI; D'ALESSANDRO, 2002), (D'ALESSANDRO, 2007). Trata-se aqui de uma extensão de conceitos já desenvolvidos dentro da Teoria Geométrica de Controle (ISIDORI, 1995), (JURDJEVIĆ, 1997), (BULLO; LEWIS, 2004).

O conceito dual da *Controlabilidade*, a *Observabilidade*, diz respeito à reconstrução de um estado do sistema, ou em que grau é possível determinar tal estado, a partir da medida dos valores de saída e do conhecimento da entrada u(t). Tal teoria, no contexto quântico, e de forma análoga à Controlabilidade Quântica, está também embasada matematicamente na Teoria de Grupos e Álgebras de Lie (D'ALESSANDRO, 2003), (D'ALESSANDRO, 2007).

Em Controle Quântico, um dos expedientes empregados para a reconstrução do estado quântico do sistema de interesse, é, no entanto, o método conhecido como "Quantum State Tomography", que permite estimar o valor esperado de um observável A qualquer para um sistema quântico em um dado estado $|\psi\rangle$, ou seja, $\langle A\rangle_{\psi}$, utilizando os resultados de um grande número de medidas seletivas desses observáveis em N sistemas quânticos idênticos. Com efeito, como a medida de uma grandeza observável dá um certo resultado com a probabilidade dependendo do estado em questão, medidas de observáveis apropriados em muitas cópias do mesmo sistema quântico podem ser usadas para determinar o estado do sistema com algum grau de confiabilidade (D'ARIANO; PARIS; SACCHI, 2004).

É oportuno destacar aqui as principais diferenças entre os paradigmas de controle "malha aberta" e "malha fechada" dentro do contexto do Controle Quântico, bem como as implicações subjacentes ao emprego de ambos.

Em malha aberta, uma lei de controle u(t) é definida antes do experimento, e atua ao longo da evolução dinâmica do sistema sem alterações. Com relação ao caso de malha fechada, deve-se ter em mente que o postulado quântico da medida é tal que impede uma implementação direta de um controle de realimentação, haja vista que a operação de medida, em geral, desloca o estado quântico do sistema para um dos autoestados da variável dinâmica quântica sendo medida. Pode-se, no entanto, contornar essa limitação valendo-se de alguns expedientes.

Primeiramente, por exemplo, poder-se-ia dispor de um número suficientemente grande de sistemas quânticos idênticos, evoluindo nas mesmas condições, a partir das mesmas condições iniciais, de modo que se efetuem medidas sobre eles ligeiramente espaçadas no tempo, simulando, com isso, um processo contínuo de medição. Assim, a cada passo de tempo, os sistemas nos quais as medidas já tenham sido efetuadas não são mais considerados, e o controle é modificado para influenciar as dinâmicas dos sistemas remanescentes, de modo a simular um controle por feedback.

Esquemas mais genuínos, por assim dizer, de controle por realimentação em um único sistema quântico podem ser implementados através de "medidas contínuas fracas" (continuous weak measurements) (LLOYD, 2000), de modo que a modificação do estado (redução quântica de estado ou colapso da função de onda) do sistema seja lenta o suficiente para que possa ser compensada através de um controle apropriado. Nesses casos, o modelamento da dinâmica tem que ser modificado para incluir a retroação das medidas. Destarte, o modelo resultante expressa-se através de equações diferenciais estocásticas (tem-se a chamada "equação de Schrödinger estocástica"), de sorte que os métodos de controle são baseados na Teoria de Controle Estocástico (WISEMAN, 1993), (WISEMAN; MILBURN, 2009).

As estratégias de Controle a serem estudadas e empregadas neste Trabalho, salvo menção expressa em contrário, são baseadas em modelos quânticos determinísticos e em projetos de leis de controle em malha aberta.

Por fim, deve-se ressaltar que as aplicações potenciais de Controle Quântico são promissoras, podendo contribuições extremamente trazer importantes ao desenvolvimento de campos científicos e tecnológicos variados, de grande atualidade, e, pode-se dizer, situados na vanguarda do conhecimento, como, por exemplo, (D'ALESSANDRO, 2007), (WISEMAN; MILBURN, 2009), otimização de reações químicas, o que já tem sido implementado por meio de campos eletromagnéticos e lasers cuidadosamente arranjados, e.g. (SHAPIRO; BRUMER, 1997) e (ASSION et al., 1998); microscopia eletrônica e metrologia quântica; tecnologias de aceleração, detecção e colisão de partículas; tecnologia avançada de dispositivos de estado sólido; nanociência e nanotecnologia; "fotônica", "spintrônica", e, especialmente, a área de Computação Quântica, a qual, apesar de já dispor de fundamentos teóricos bem estabelecidos (NIELSEN; CHUANG, 2000), (KITAEV; SHEN; VYALYI, 2002), carece ainda de uma implementação viável e funcional em termos do hardware físico necessário para o processamento da Informação Quântica. Uma das opções mais pesquisadas atualmente para tal implementação consiste no aprisionamento e na manipulação de íons. Com efeito, podem-se citar estudos, nesse sentido, datando, já, da década de 90, como, por exemplo, o de Cirac e Zoller (1995) e um de James (1999). Quer se valha desse expediente para a implementação de um "hardware quântico", quer de outro qualquer, naturalmente, emerge a necessidade de algum tipo de controle para o sistema quântico de processamento de informação.

No próximo Capítulo, faremos uma revisão sucinta da literatura de Controle Quântico, imbuída de um certo viés histórico. Temos em vista que, apesar de ser uma área de pesquisa relativamente nova, a literatura científica disponível é muito extensa, em virtude dos vários métodos de controle desenvolvidos, ou em desenvolvimento, bem como da ampla gama de estudos aplicados que têm sido levados a cabo nas últimas duas décadas. Ademais, muitos artigos e textos são citados e discutidos ao longo de toda Tese, a começar pela presente Introdução.

No Capítulo 2, procuramos fazer uma introdução teórica dos fundamentos básicos da Mecânica Quântica, necessários à compreensão do restante da Tese. A abordagem tenta ser rigorosa do ponto de vista matemático e teórico, bem como cuidadosa e suficientemente detalhada, no afã de introduzir adequadamente o formalismo abstrato padrão da Mecânica Quântica. Tendo em vista que esta é uma Tese de Engenharia Elétrica, e, que, talvez, possa despertar o interesse de Engenheiros Eletricistas e Eletrônicos, de Engenheiros de Controle e de Computação, julgamos oportuna a inserção de tal Capítulo na Tese, uma vez que tal formalismo não faz parte dos currículos de Engenharia. De modo geral, fomos norteados pelo princípio de tornar este Texto o mais autocontido possível, sem assumir nenhum conhecimento prévio, seja ele físico ou matemático, o qual possa ser não familiar a Engenheiros.

No Capítulo 3, descrevemos sucintamente a formulação do problema de Controle de Sistemas Quânticos, de um ponto de vista fenomenológico, dando ênfase ao paradigma de Controle em Malha Aberta.

No Capítulo 4, a Controlabilidade Quântica, em termos de "Controlabilidade de Operador ou Completa" e "Controlabilidade de Estado Puro" é abordada. Faz-se necessária uma introdução relativamente extensa do ferramental matemático básico, que é imprescindível para o estabelecimento da Teoria de Controlabilidade no contexto quântico.

O Capítulo 5, de importância teórica crucial para a Tese, introduz a problemática básica de Controle Ótimo, sua extensão para Sistemas Quânticos, condições de optimalidade, exemplos de aplicações e uma exposição acerca do Controle Ótimo de Tempo Mínimo, sendo este último, talvez, a variante mais relevante de Controle Ótimo Quântico, conforme veremos. Este Capítulo termina com uma discussão sobre algoritmos e métodos numéricos, os quais são imprescindíveis para a solução da grande maioria de problemas de Controle Quântico Ótimo.

No Capítulo 6, em consonância com as idéias e com a problemática subjacentes ao Controle Quântico de Tempo Ótimo, partimos de considerações teóricas acerca do menor tempo fisicamente possível para que ocorra uma dada transição de estados quânticos. Em Mecânica Quântica, tal questão está intimamente ligada com a Relação de Incerteza de Energia-Tempo, a qual possui uma natureza distinta das Relações de Incerteza de Heisenberg para Observáveis Quânticos Incompatíveis, mas, com efeito, está essencialmente relacionada com a Dinâmica Quântica, conforme será explorado em detalhe ao longo do Capítulo. Tal investigação teórica deu-nos o ensejo necessário para propormos uma medida quantitativa da eficiência dos Controles Quânticos de Tempo Ótimo, na forma de Fatores de Mérito associados a Sistemas de Controle Quântico. Formulações gerais e estudos de caso particulares são levados a cabo neste Capítulo.

No Capítulo 7, retomamos a problemática proposta no Capítulo anterior, mas, desta vez, sem recorrermos à hipótese de aproximação, lá proposta e estruturada, do emprego de Hamiltonianos Independentes no Tempo para a definição dos Fatores de Mérito de Controle Quântico de Tempo Ótimo. Com efeito, investigamos como a dependência temporal no Hamiltoniano do sistema controlado pode ser tratada, bem como quantificada por meio de novos Fatores de Mérito, consonantes com a hipótese de Hamiltonianos Dependentes do Tempo.

No Capítulo 8, tentamos propor uma nova abordagem para atacar problemas de Controle Quântico Ótimo no contínuo, mais especificamente, no que diz respeito ao controle espaço-temporal de partículas quânticas, valendo-nos, para tanto, das Integrais Funcionais de Trajetória de Feynman. A motivação para tal proposta parte de duas premissas fundamentais. A primeira delas está relacionada à dificuldade de se tratar problemas de Controle Quântico em sistemas contínuos, de dimensão infinita, ou, equivalentemente, com espectro infinito de autovalores (resultantes de Operadores ou Observáveis Quânticos atuando em estados quânticos dados por uma base infinita de autoestados). Trata-se, pois, de um problema difícil, pouco explorado e em aberto, conforme D'Alessandro ressalta em seu texto de Controle Quântico (D'ALESSANDRO,

2007). Em segundo lugar, podemos mencionar o fato de que nos parece ser uma abordagem natural, no sentido em que os princípios variacionais, comuns à Teoria de Controle Ótimo e à Mecânica Analítica, por exemplo, estão também presentes na formulação de Feynman da Dinâmica Quântica, os quais, com efeito, deram-lhe o ensejo necessário para lançar um novo e notável vislumbre teórico sobre os fundamentos da Mecânica Quântica (FEYNMAN, 1948), bem como elaborar as bases da teoria de Integrais de Trajetória, a qual se mostrou extremamente profícua em diversos campos da Física Teórica e Aplicada, e, mesmo, fora dela (FEYNMAN; HIBBS, 1965), (SCHULMAN, 1981), (RYDER, 1996), (SREDNICKI, 2007), (KLEINERT, 2009). A partir da formulação em termos de Integrais de Trajetória, tentamos também propor o uso do Efeito Aharonov-Bohm como uma estratégia de Controle Quântico.

Por fim, seguem nossas conclusões e considerações finais acerca deste Trabalho, e as referências bibliográficas.

1 REVISÃO DA LITERATURA

"Was du ererbt von deinen Vätern hast, erwirb es, um es zu besitzen."

Johann Wolfgang von Goethe - "Faust" (Teil 1)

As pesquisas pioneiras em Controle de Sistemas Quânticos, ou, simplesmente, Controle Quântico, justificando o emprego desta terminologia, bem como respaldando a existência autônoma e *de facto* deste novo campo de investigação científica, de natureza eminentemente interdisciplinar, surgiram por volta do início dos anos 80. Com efeito, podemos citar um trabalho seminal publicado em 1983, no prestigioso *Journal of Mathematical Physics* (vinculado ao *American Institute of Physics*), o qual, no entanto, foi submetido cerca de dois anos e três meses antes, em 1981. Trata-se do artigo de Huang, Tarn e Clark (1983) intitulado "On the Controlability of Quantum-Mechanical Systems". Nele, os autores desenvolvem um extenso tratamento analítico acerca da controlabilidade de sistemas quânticos regidos por uma Equação de Schrödinger da sequinte forma (*sic*):

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(t) = \left[H'_0 + \sum_{l=1}^r u_l(t)H'_l\right]\psi(t) \quad (1.1);$$

na qual, H'_0 , H'_1 ,..., H'_r são operadores lineares, hermiteanos, habitando o Espaço de Hilbert H, do sistema quântico; e, $u_l(t)$ são as funções reais de t, representando os controles; e, H'_0 , o Hamiltoniano que determina a evolução dinâmica livre do sistema; tratando-se, pois, de um sistema de controle bilinear (HUANG; TARN; CLARK, 1983).

A abordagem levada a cabo pelos autores é eminentemente formal e matemática, fortemente pautada em Variedades Diferenciáveis e na linguagem da

Geometria Diferencial Moderna ¹; e em Teoria de Grupos e Álgebras de Lie ², valendose, também, de forma essencial, da Teoria de Controle Geométrica, que estava sendo desenvolvida, principalmente, por Sussmann e Jurdjević, a partir da década de 70. Tais trabalhos originais, da época, estão listados nas referências bibliográficas de (HUANG; TARN; CLARK, 1983).

É interessante e oportuno mencionar também que Huang, Tarn e Clark (1983) reconhecem a importância de dois trabalhos anteriores, datados de 1979, publicados por dois pesquisadores soviéticos, a saber, A. G. Butkovskiy e Y. I. Samoylenko, os quais, de acordo com os autores supracitados: "discussed the control of quantum objects in broad terms and laid out a framework for further studies" ³.

Com efeito, as pesquisas levadas a cabo por Butkovskyi e Samoylenko, ao longo de mais de uma década, resultaram no primeiro livro-texto dedicado ao Controle de Sistemas Quânticos, de que temos conhecimento, (BUTKOVSKIY; SAMOYLENKO, 1990).

A partir da década de 90, surgiram vários trabalhos de tanto de natureza teórica, como de natureza aplicada. Entre a primeira categoria deles, podemos citar, por exemplo, um dos estudos pioneiros em Controle Ótimo Quântico: (DAHLEH; PEIRCE; RABITZ, 1990); bem como outros versando sobre Controle Quântico por Feedback: (WISEMAN, 1993), (DOHERTY *et al.*, 2000) e (LLOYD, 2000); e um, devido a Ramakhrishna (1995), sobre Controlabilidade de sistemas moleculares ⁴. Com relação a estudos aplicados, destacam-se aqueles voltados ao controle de processos moleculares e reações químicas, como (SHAPIRO; BRUMER, 1997) e (ASSION *et al.*, 1998).

¹ A qual encontra-se em textos avançados como (LANG, 2001) e (LEE, 2009), por exemplo.

² Por exemplo, (GILMORE, 1974) e (KNAPP, 2002).

³ Esses trabalhos também constam nas referências bibliográficas de (HUANG; TARN; CLARK, 1983).

⁴ É interessante notar que todos esses trabalhos mencionados foram publicados no *Physical Review A*.

Não menos importante, é ressaltar que, a partir da segunda metade da década de 90, cresceu enormemente o interesse em Computação Quântica, devido, principalmente, a um influente trabalho de um matemático e cientista da computação estadunidense, Peter Shor, que desenvolveu, em 1994, um algoritmo quântico de fatoração de números primos ⁵, o qual, uma vez executado em um hardware quântico, seria exponencialmente mais rápido que o mais eficiente algoritmo clássico, rodado no mais poderoso computador clássico disponível (NIELSEN; CHUANG, 2000), (KITAEV; SHEN; VYALYI, 2002).

Diversas propostas para a implementação física de um hardware quântico funcional e viável têm sido propostas, desde então, sendo a mais comum delas, por meio de confinamento de íons e manipulação de seus spins, como meio de fornecer os *q-bits* ("*quantum bits*") necesários ao processamento de Informação Quântica. Neste sentido, podemos citar os estudos de Cirac e Zoller (1995), de James (1999) e o mais recente (RANGAN *et al.*, 2004), o qual formula a questão em termos de um problema de Controle.

Em 2002, é publicado um segundo livro-texto de Controle Quântico, mas, o qual coloca sua ênfase em estudos aplicados ao controle de reações químicas e de processos moleculares (SHAPIRO; BRUMER, 2002).

Também na década passada, outras Métodos de Controle Quântico foram apresentados e desenvolvidos, como por exemplo, o chamado "Controle Quântico de Lyapunov". Ferramenta já bastante conhecida, e poderosa em projetos de controle não-linear, dentro do contexto de sistemas quânticos, estabelece-se uma função de Lyapunov adequada, positiva-definida, estruturada em termos da descrição quântica do sistema e tendo como argumentos os seus respectivos estados, de sorte que o(s) controle(s) adequado(s) u(t), é (são) aquele(s) que torna(m) negativa a derivada temporal da função ao longo da trajetória para todo tempo $t > t_0$ (GRIVOPOULOS; BAMIEH, 2003), (MIRRAHIMI; ROUCHON; TURINICI, 2005).

-

⁵ Tal problema computacional, envolvendo números grandes, é amplamente estudado em Teoria de Complexidade Computacional. Trata-se de um exemplo clássico de "Problema NP".

Outras duas metodologias de Controle que podemos citar são as seguintes.

A proposta por Yanagisawa e Kimura (2003a,b), a qual trata o Controle Quântico por meio de Funções de Transferência, sendo pautada no tratamento estocástico ("Equação de Schrödinger Estocástica" ou "Equação de Schrödinger-Itô"), comum às metodologias de Controle Quântico que incorporam o princípio de feedback, conforme mencionamos na Introdução (WISEMAN; MILBURN, 2009).

E, a segunda delas, o chamado "Controle STIRAP" - que é um acrônimo de "Stimulated Raman Scattering Involving Adiabatic Passage". Este tipo Método de Controle combina a ação de pulsos eletromagnéticos monocromáticos, dotados de uma freqüência determinada, próxima àquela que corresponde à energia de transição de níveis energéticos de populações de partículas, em um espectro discreto de energia, com a ação de um Controle Adiabático, que se vale de lentas variações do esforço de controle u(t), e, conseqüentemente, do Hamiltoniano associado (COULSTON; BERGMANN, 1992), (BERGMANN; THEUER, 1998), (SHAPIRO; BRUMER, 2002).

Por fim, gostaríamos de tecer comentários breves acerca de dois livros-textos modernos dedicados ao Controle Quântico, como uma disciplina autônoma, *per se*, ainda que multifacetada e fortemente marcada pelo caráter interdisciplinar. São, a saber, os textos de D'Alessandro (2007) e de Wiseman e Milburn (2009). O primeiro deles, pode-se dizer, é a referência padrão de Controle Quântico do ponto de vista de estratégias de controle de malha aberta e modelos determinísticos de sistemas quânticos. Alia considerável detalhe e rigor matemático em sua exposição. O segundo texto é devotado ao Controle Quântico tendo por base processos de medida e metodologias de feedback. O tratamento é eminentemente probabilístico e calcado em teoria estocástica de sistemas e controle.

No Capítulo 2, a seguir, procuramos introduzir os conceitos básicos da Cinemática e da Dinâmica Quântica. Optamos por seguir, principalmente, o tratamento de Sakurai (1994), que é um texto amplamente utilizado em cursos de Pós-Graduação

de Mecânica Quântica em âmbito mundial, e o qual julgamos ser assaz conveniente por imergir o leitor diretamente no formalismo quântico abstrato, corrente não apenas na Mecânica Quântica Moderna, mas também em Informação Quântica, Computação Quântica e em Controle Quântico, com o rigor adequado e necessário.

Outros excelentes textos que podemos recomendar são os seguintes: (PIZA, 2003), (GOTTFRIED; YAN, 2004) e (WEINBERG, 2012). Este último, em particular, é um texto conciso, com magníficos insights físicos e a visão idiossincrática de um dos maiores físicos teóricos vivos. Ressaltamos, também, que Piza (2003) e Weinberg (2012), em seus capítulos iniciais, trazem um interessante e detalhado panorama histórico do desenvolvimento da Mecânica Quântica. Para o leitor mais matematicamente inclinado, (TAKHTAJAN, 2008), (FOLLAND, 2008) e, em especial, (HALL, 2013) são excelentes opções.

2 FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

"Physical laws should have mathematical beauty."

Paul A. M. Dirac.

Em linhas gerais, a Mecânica Clássica, na forma como fora definida a partir dos trabalhos de Euler, Lagrange, Hamilton, Jacobi, entre outros, descreve o movimento de partículas e corpos macroscópicos em termos de *coordenadas generalizadas*, q e q-ponto, gerando-se, com isso, um espaço de fases associado, ao longo do qual as trajetórias resultantes da evolução dinâmica de um sistema clássico genérico são definidas.

As equações que descrevem a evolução dinâmica de um sistema clássico podem ser obtidas a partir do funcional da ação associado, impondo-se nula a primeira variação da ação ⁶:

$$S = \int_{t_0}^{t} L(q, \dot{q}, t) dt \to \delta S = 0 \to \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$$
 (2.1);

em que L é a função Lagrangiana - função escalar das coordenadas generalizadas e do tempo, sendo definida como L = T - V. Após a minimização da ação, ou, de uma maneira mais formal, impondo-se que o funcional da ação seja estacionário com respeito a uma primeira variação, obtêm-se, através de uma integração por partes, as equações diferenciais a derivadas parciais de Euler-Lagrange (2.1), as quais descrevem a evolução dinâmica do sistema clássico em questão em termos de suas coordenadas generalizadas. As equações diferenciais ordinárias correspondentes à

⁶ No Capítulo 7 da presente Tese, introduziremos alguns conceitos fundamentais de Cálculo das Variações e de Mecânica Analítica.

Segunda Lei de Newton aplicada ao sistema são recuperadas naturalmente a partir das equações de Euler-Lagrange.

Na Mecânica Quântica, os estados físicos de um sistema são representados por vetores que habitam um *Espaço de Hilbert*. Eles contêm toda a informação física acerca do sistema em questão.

As grandezas físicas observáveis, por exemplo, posição, momento linear, momento angular, energia, spin, etc, são representadas por operadores lineares *hermiteanos* que atuam sobre esses vetores de estado.

Assim, faz-se necessário introduzir esses supracitados conceitos matemáticos de uma maneira mais formal. Seguiremos, na Seção seguinte, principalmente, o tratamento de (KREYSZIG, 1989).

2.1 CONSIDERAÇÕES MATEMÁTICAS PRELIMINARES

Em primeiro lugar, devemos definir matematicamente o conceito de Espaço de Hilbert:

Definição 2.1.1: Um Espaço de Hilbert é um espaço *métrico* (define-se uma função distância), *vetorial*, *normado* (é também um Espaço de Banach), *completo* (no sentido de que toda seqüência de Cauchy é convergente), e dotado de *produto interno ou escalar*. É um espaço vetorial sobre o corpo dos números complexos (os escalares, em geral, são complexos).

A fim de esmiuçarmos tal definição, concentremo-nos agora nas definições de Espaço Métrico, Espaço Vetorial e Espaço Vetorial Normado (ou Espaço de Banach):

Definição 2.1.2: Um Espaço Métrico é um conjunto X de elementos, dotado de uma métrica d, (X,d) com d: $X \times X \rightarrow |R$, a qual goza das seguintes propriedades:

- i) d é finita, não-negativa e real;
- ii) d(x,y) = 0 se, e somente, se x = y;
- iii) d(x,y) = d(y,x);
- iv) $d(x,y) \le d(x,z) + d(z,y)$ (Designaldade Triangular).

Definição 2.1.3: Um Espaço Vetorial ou Espaço Linear (sobre um corpo K de escalares) é um conjunto X de elementos, ditos *vetores*, que satisfazem as seguintes operações algébricas com relação à soma de vetores e à multiplicação por escalares:

- i) x+y = y+x;
- ii) X+(y+z) = (X+z)+y;
- iii) x + 0 = x;
- iv) x+(-x) = 0;
- $v) \quad \alpha(\beta x) = (\alpha \beta) x;$
- vi) 1x = x;
- vii) $\alpha(x+y)=\alpha x+\alpha y$;
- viii) $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$.

Definição 2.1.4: Um Espaço Vetorial Normado - ou Espaço de Banach - goza de todas as propriedades anteriores, dispondo, adicionalmente, de uma função *Norma*, definida no Espaço (X,d), tal que $||x||: X \to |R$, e a qual satisfaz as seguintes propriedades:

- i) $||x|| \ge 0$;
- ii) ||x|| = 0 se, e somente se, x = 0;
- iii) $||\alpha x|| = |\alpha| \cdot ||x||$;
- iv) $||x+y|| \le ||x|| + ||y||$;
- v) d(x,y) = ||x-y||;

sendo que em v), vemos que a norma define uma distância entre os vetores do espaço, ou seja, pode-se falar de uma métrica induzida pela norma.

A seguir, atemo-nos na definição de Completude de um Espaço Métrico, relacionada à convergência das seqüências de Cauchy lá definidas:

Definição 2.1.5: Uma seqüência $\{x_n\}$ em um Espaço Métrico X = (X,d) é dita de Cauchy, se, para todo $\varepsilon > 0$, existe um N, $N = N(\varepsilon)$, tal que: $d(x_n, x_m) < \varepsilon$, para todos m, n > N. O Espaço X é dito ser *completo* se, e somente se, toda seqüência de Cauchy em X é convergente, isto é, toda seqüência de Cauchy definida nesse espaço tem um limite que é um elemento de X.

Em outras palavras, um espaço completo é um espaço sem "buracos". Com efeito, como exemplo clássico, o espaço dos números racionais Q não é completo, pois seqüências de Cauchy lá definidas podem convergir para um elemento que não pertence a Q, ou seja, não se pode tornar arbitrariamente pequeno o valor de ε , sem que o limite da seqüência não "salte fora" para um elemento que não pertence a Q, ou seja, um número irracional pertencente ao conjunto R.

Por fim, de posse de todas as definições anteriores, define-se um Espaço de Hilbert, que é um espaço métrico, vetorial, normado, completo e dotado de *Produto Escalar* ou *Produto Interno*, mediante à definição deste último objeto:

Definição 2.1.6: Dado um Espaço X, vetorial sobre o corpo K de escalares, e normado, o Produto Interno entre dois elementos x e y de X, é uma função $\langle x,y \rangle : X \times X \to K$, a qual goza das seguintes propriedades:

- i) $\langle X+Y,Z\rangle = \langle X,Z\rangle + \langle Y,Z\rangle$;
- ii) $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle$;
- iii) $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle^*$;
- iv) $\langle x, x \rangle \ge 0$; com $\langle x, x \rangle = 0$ se, e somente se, x = 0.

Temos ainda, com relação ao objeto Norma, as propriedades:

- i) $||x|| = \sqrt{(\langle x, x \rangle)};$
- ii) $d(x,y) = ||x-y|| = \sqrt{(\langle x-y, x-y \rangle)}$.

Com efeito, o Produto Interno, em um Espaço de Hilbert, que é um Espaço de Banach, induz uma norma e uma métrica (função distância).

Por fim, a partir das Propriedades *i*, *ii* e *iii* do Produto Interno, pode-se deduzir facilmente que são válidas as seguintes relações:

- i) $\langle \alpha x + \beta y, z \rangle = \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle$;
- ii) $\langle x, \alpha y \rangle = \alpha^* \langle x, y \rangle$;
- iii) $\langle x, \alpha y + \beta z \rangle = \alpha^* \langle x, y \rangle + \beta^* \langle x, z \rangle$;
- iv) e, se $\langle x, y \rangle = 0$, os vetores x e y são ditos serem *ortogonais*.

2.2 A NOTAÇÃO DE DIRAC NA MECÂNICA QUÂNTICA

2.2.1 Estados

Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984) introduziu um poderoso formalismo matemático, já na primeira edição de seu célebre tratado "The Principles of Quantum Mechanics", (DIRAC, 1958), o qual permitiu unificar as abordagens existentes da Mecânica Quântica na década de 20, a saber, a "Mecânica Ondulatória", preconizada por Erwin Schrödinger, e a "Mecânica das Matrizes", oriunda dos trabalhos de Werner Heisenberg, Max Born e Pascual Jordan. O alcance e a elegância do formalismo de Dirac são tais, que este se tornou a linguagem padrão, natural, na qual a Mecânica Quântica é expressa até os dias de hoje.

Neste formalismo, os estados quânticos são representados em termos dos vetores "bras" e "kets" de Dirac, os quais gozam de uma relação de dualidade, condizente com as propriedades matemáticas do Espaço de Hilbert:

$$|\alpha\rangle\leftrightarrow\langle\alpha|$$

$$a|\alpha\rangle \leftrightarrow a^*\langle\alpha|$$

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle \longleftrightarrow a^*\langle\alpha| + b^*\langle\beta|.$$

Pode-se construir um vetor *ket* a partir da soma de outros dois *ket*s, multiplicados por escalares quaisquer (*Princípio de Superposição de Estados Quânticos*):

$$|\gamma\rangle = a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle$$
;

de sorte que o análogo vale também para os bras:

$$\langle \gamma | = a \langle \alpha | + b \langle \beta |$$
.

O Produto Interno, propriedade de que goza o Espaço de Hilbert, pode, então, ser expresso na forma:

$$\langle \alpha \| \alpha \rangle \equiv \langle \alpha | \alpha \rangle;$$

diz-se, então, tratar-se de um "bracket" (colchete) de Dirac.

Define-se, assim, naturalmente a norma de um *ket* (ou *bra*) como sendo (norma induzida pelo produto interno):

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$$
.

Se um ket é tal que: $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$, diz-se que o estado quântico respectivo está normalizado. Ademais, podemos garantir a normalização de um estado valendo-se de sua norma: $|\alpha \rangle = \frac{|\alpha \rangle}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}}$.

Ainda, com relação à dualidade e ao produto interno, é válida a relação entre dois vetores *bras* e *kets* (novamente estando coerente com as propriedades do Espaço de Hilbert):

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$$
.

Se, verifica-se a relação abaixo para dois vetores arbitrários, $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, ambos distintos do vetor nulo, então os mesmos são ditos ser *ortogonais*:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^* = 0.$$

2.2.2 Observáveis e Expansões de Estado

Na Mecânica Quântica, os *observáveis físicos* são representados por *operadores lineares hermiteanos*, que atuam sobre os vetores de estado:

$$\hat{X}(|\alpha\rangle) = \hat{X}|\alpha\rangle = |\beta\rangle;$$

ou seja, um operador \hat{X} atuando sobre um estado qualquer $|\alpha\rangle$, um ket , fornece, em geral, um outro $\mathit{ket}\,|\beta\rangle$.

Se, para um ket arbitrário $|\alpha\rangle$, temos a relação: $\hat{X}|\alpha\rangle = \hat{Y}|\alpha\rangle$, então, os operadores X e Y são iguais: $\hat{X}=\hat{Y}$. Ademais, se: $\hat{X}|\alpha\rangle = |0\rangle$, ou seja, a atuação do operador X em um ket arbitrário $|\alpha\rangle$, que não o ket nulo, $|0\rangle$, resulta neste último, então, o operador X é dito ser o $Operador\ Nulo$.

Quanto à soma, valem as propriedades comutativa e associativa entre os operadores:

$$X + Y = Y + X$$
:

$$X + (Y+Z) = (X+Y) + Z$$
.

E a propriedade distributiva como se segue:

$$\hat{X}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\hat{X}|\alpha\rangle + b\hat{X}|\beta\rangle$$
.

A operação sobre os vetores bras é análoga, e goza da relação de dualidade:

$$\hat{X}\hat{Y}|\alpha\rangle = \hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle) \leftrightarrow (\langle\alpha|\hat{Y}^{\dagger})\hat{X}^{\dagger} = \langle\alpha|\hat{Y}^{\dagger}\hat{X}^{\dagger};$$

em que \hat{X}^{\dagger} e \hat{Y}^{\dagger} são os *Hermiteanos Adjuntos* de X e Y, respectivamente.

Um *Operador Linear* é dito ser *Hermiteano* se $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$.

Com relação à multiplicação, os operadores são, em geral, não-comutativos, ou seja, $XY \neq YX$. Não obstante, são associativos: X(YZ) = (XY)Z = XYZ.

Temos, ainda, a validade da relação: $(XY)^{\dagger} = Y^{\dagger}X^{\dagger}$, pois, conforme visto, pela propriedade de dualidade: $\hat{X}\hat{Y}|\alpha\rangle = \hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle) \leftrightarrow (\langle\alpha|\hat{Y}^{\dagger})\hat{X}^{\dagger} = \langle\alpha|\hat{Y}^{\dagger}\hat{X}^{\dagger}$.

Estamos agora em condições de enunciar e provar o seguinte e importante

Teorema: Os autovalores de um operador hermiteano *A* são reais, e os autovetores (autoestados), correspondentes aos diferentes autovalores, são ortogonais.

Prova:

Primeiramente, temos válida a relação de operador, autoestado e autovalor:

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle$$
 (2.2.2.1).

Pelo fato de *A* ser hermiteano, é válido ainda:

$$\langle a'' | \hat{A} = a''^* \langle a'' |$$
 (2.2.2.2);

em que a', a'', ... são os autovalores de A. Multiplicando ambos os lados de (2.2.2.1) por $\langle a'' |$, e ambos os lados de (2.2.2.2) por $|a' \rangle$, e subtrairmos as expressões resultantes, obtemos:

$$(a'-a''^*)\langle a''|a'\rangle = 0$$
 (2.2.2.3).

Pode-se, agora, tomar a' e a'' como sendo iguais (os mesmos), ou como sendo diferentes. Tomando-os inicialmente como iguais, deduz-se, de imediato, a partir de (2.2.2.3), a condição de realidade dos autovalores: $a'=a'^*$, considerando-se o fato de que $|a'\rangle$ não é o ket nulo.

Assumindo-se agora a' e a'' como sendo diferentes, em função da realidade dos autovalores deduzida, temos que $a'-a''^*=a'-a''$, relação que não pode ser nula por hipótese. Logo, o produto interno $\langle a''|a'\rangle$ deve ser nulo em virtude de (2.2.2.3), o que

prova a segunda parte do Teorema, que diz respeito à propriedade de ortogonalidade dos autoestados

.

Assim, garante-se que *todas as grandezas físicas medidas são sempre reais* – são os autovalores do operador, quando este é aplicado em um estado quântico, expresso na base dada pelos autovetores do operador.

Com efeito, de posse deste fato matemático, podemos expandir um estado quântico $|\alpha\rangle$ qualquer como combinação linear dos autoestados de um operador hermiteano A qualquer:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} ca' |a'\rangle$$
 (2.2.2.4);

sendo que, a partir da expressão (2.2.2.4), podemos deduzir os coeficientes *ca'* da expansão:

$$\langle a'' | \alpha \rangle = \sum_{a'} ca' \langle a'' | a' \rangle \Rightarrow \langle a' | \alpha \rangle = ca' \langle a' | a' \rangle = ca'.1$$

$$\therefore ca' = \langle a' | \alpha \rangle \quad (2.2.2.5);$$

uma vez que, no somatório, todos os produtos escalares de autovetores de índices diferentes são nulos, devido à ortonormalidade dos autoestados, de modo que ficamos com (2.2.2.5).

Assim, tendo em vista as expressões anteriores (2.2.2.4) e (2.2.2.5), podemos ainda expressar o estado quântico $|\alpha\rangle$ na forma:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$
 (2.2.2.6);

de sorte que (2.2.2.6)⁷ dá-nos o ensejo de definir um *Operador de Projeção*:

$$\Lambda a' \equiv |a'\rangle\langle a'|$$
 (2.2.2.7);

de tal forma, que seja válida a Relação de Completude:

$$\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = \hat{1} \Rightarrow \sum_{a'} \Lambda a' = \hat{1} \quad (2.2.2.8);$$

ou seja, a somatória sobre todos os *produtos externos* envolvendo todos os autoestados $|a'\rangle$ do operador A deve corresponder ao *Operador Identidade*. Tal exigência refere-se à completude da base formada pelos autoestados $|a'\rangle$, a qual possibilita expressarmos um estado quântico qualquer $|\alpha\rangle$ em termos da combinação linear dos autoestados $|a'\rangle$ de A^8 .

2.2.3 Representações Matriciais de Observáveis e de Estados

Valendo-se da relação de completude (2.2.2.8), aplicando-a duplamente sobre um operador *X* qualquer, podemos representá-lo na forma de uma matriz quadrada como se segue:

$$\hat{X} \coloneqq \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle\langle a''| \hat{X} |a'\rangle\langle a'| \quad \text{(2.2.3.1)};$$

 7 Tal expansão é análoga à projeção de um vetor no espaço euclideano em cada um dos versores de direção.

⁸ Ademais, a relação de completude tem relação direta com a conservação de probabilidades em processos de medidas e transições de estados, as quais quais devem somar probabilidade total 1, conforme ficará claro mais adiante.

de sorte que há N^2 elementos matriciais (números) da forma: $\langle a''|\hat{X}|a'\rangle$, com $\langle a''|\hat{X}|a'\rangle = \langle a'|\hat{X}^{\uparrow}|a''\rangle^*$, por relação de dualidade; sendo que, o elemento da esquerda corresponde à linha, e, o da direita, à coluna da matriz, que representa o operador. Portanto, a representação matricial do operador toma a forma:

$$\hat{X} := \begin{pmatrix} \left\langle a^{1} \middle| \hat{X} \middle| a^{1} \right\rangle & \left\langle a^{1} \middle| \hat{X} \middle| a^{2} \right\rangle & \dots \\ \left\langle a^{2} \middle| \hat{X} \middle| a^{1} \right\rangle & \left\langle a^{2} \middle| \hat{X} \middle| a^{2} \right\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$
 (2.2.3.2).

Analogamente, de posse dos coeficientes de expansão dos vetores (estados quânticos) – expressão (2.2.2.5), podemos também expressá-los matricialmente: em matrizes coluna para *kets*; e em matrizes linha para *bras*. Vejamos, como exemplo, a representação matricial de um *ket* qualquer:

$$|\alpha\rangle := \begin{pmatrix} \langle a^1 | \alpha \rangle \\ \langle a^2 | \alpha \rangle \\ \langle a^3 | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (2.2.3.3).$$

Ainda no tocante à representação matricial de Observáveis, a matriz de representação de um observável *A* torna-se particularmente simples, se os autoestados (*eigenkets*) de *A* são tomados eles mesmos como os *kets* de base:

$$\hat{A} := \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle\langle a''| \hat{A} |a'\rangle\langle a'| \qquad (2.2.3.4);$$

com efeito, a matriz quadrada definida pelos elementos $\langle a''|\hat{A}|a'\rangle$ é diagonal ⁹, logo:

-

⁹ É um fato conhecido em Álgebra Linear a diagonalização de uma matriz ou operador através de seus autovetores (HASSANI, 1999), (ROMAN, 2007).

$$\langle a''|\hat{A}|a'\rangle = \langle a''|\hat{A}|a'\rangle \delta a'a'' = a'\langle a''|a'\rangle \delta a'a'' = a'\delta a'a'' ;$$

de sorte que:

$$\hat{A} = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} a' \Lambda a' \quad (2.2.3.5);$$

sendo que (2.2.3.5) expressa a representação de um operador *A* por meio de seus autoestados e autovalores.

Como exemplo de aplicação, consideremos um Sistema de Spin ½:

Um elétron (ou um feixe deles) tem dois valores de spin possíveis: $\pm \hbar/2$. Efetuando-se uma medida na componente z, através do operador Sz, escrito de acordo com (2.2.3.5), valendo-se de seus autoestados e de seus autovalores, temos a seguinte expressão para o referido operador:

$$\hat{S}z = (\hbar/2)[|Sz+\rangle\langle Sz+|-|Sz-\rangle\langle Sz-|] \quad (2.2.3.6).$$

Temos, então, as seguintes relações de operador, autovetor e autoestado:

$$\hat{S}z|Sz+\rangle = (\hbar/2)|Sz+\rangle$$
 (2.2.3.7);

$$\hat{S}z|Sz-\rangle = -(\hbar/2)|Sz-\rangle$$
 (2.2.3.8);

Tendo em vista o que fora exposto, podemos então representar *matricialmente* os autoestados de Sz, os quais aparecem em (2.2.3.7) e (2.2.3.8), bem como o próprio operador Sz, (2.2.3.6), na base formada por $|Sz+\rangle$ e $|Sz-\rangle$, como, respectivamente:

$$|Sz+\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 (2.2.3.9);

$$|Sz-\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (2.2.3.10);

$$\hat{S}z := \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
 (2.2.3.11).

Ademais, valendo-nos dos autoestados de Sz $|S_Z+\rangle$ e $|S_Z-\rangle$ como base, podemos escrever os autoestados de Sx e Sy como (SAKURAI, 1994):

$$\left|Sx;\pm\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|Sz+\right\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\left|Sz-\right\rangle$$
 (2.2.3.12);

$$\left|Sy;\pm\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|Sz+\right\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}\left|Sz-\right\rangle$$
 (2.2.3.13);

já devidamente normalizados. Analogamente ao que se fez em (2.2.3.6), obtemos as seguintes expressões para os operadores $Sx \in Sy$:

$$\hat{S}x = (\hbar/2)[|Sz+\rangle\langle Sz-|+|Sz-\rangle\langle Sz+|]$$
 (2.2.3.14);

$$\hat{S}y = (\hbar/2)[-i|Sz+\rangle\langle Sz-|+i|Sz-\rangle\langle Sz+|]$$
 (2.2.3.15).

Por fim, obtemos as seguintes representações matriciais para os operadores *Sx* e *Sy*:

$$\hat{S}x := \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
 (2.2.3.16);

$$\hat{S}y := \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$
 (2.2.3.17).

As representações matriciais de Sx, Sy e Sz correspondem, a menos do fator $\hbar/2$, às chamadas Matrizes de Pauli:

$$\sigma_{x} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.2.3.18);$$

$$\sigma_{y} \equiv \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.2.3.19);$$

$$\sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{(2.2.3.20)};$$

as quais gozam de propriedades especiais e de grande importância na Mecânica Quântica, por exemplo, na teoria de Momento Angular (SAKURAI, 1994), (PIZA, 2003), (GOTTFRIED; YAN, 2004), (WEINBERG, 2012); e, também, na Mecânica Quântica Relativística e na Teoria Quântica de Campos (SAKURAI, 1967), (RYDER, 1996), (SREDNICKI, 2007).

No Capítulo 5, ao final da Seção 3, da presente Tese, estudaremos um sistema de controle de uma partícula de spin ½, no qual retomaremos esses conceitos.

2.3 MEDIDAS E PROBABILIDADES ASSOCIADAS

De acordo com a interpretação padrão da Mecânica Quântica, a assim conhecida "Interpretação de Copenhagen" (JAEGER, 2009), o processo de medida quântica altera, em geral, o estado quântico sendo medido, de sorte que podemos apenas calcular as probabilidades de transição associadas a processo de medida.

Como Dirac bem observa em seu monumental tratado: "(...) a measurement always cause the system to jump into an eigenstate of the dynamical variable that is being measured, the eigenvalue this eigenstate belongs to being equal to the result of the measurement (...)" (DIRAC, 1958, p. 36). Com efeito, antes da medida de um observável A ser efetuada, o sistema é suposto encontrar-se, inicialmente, em um estado $|\alpha\rangle$, dado por alguma combinação linear da forma: $|\alpha\rangle = \sum_{a'} ca' |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a' |\alpha\rangle$. Quando a medida do observável A é executada, o estado do sistema é "jogado" em algum dos autoestados $|a'\rangle$ de A, sendo que o resultado da grandeza física sendo

$$|\alpha\rangle \rightarrow$$
 Medida de $A \rightarrow |a'\rangle$, com resultado a' .

medida corresponde ao autovalor a' associado a $|a'\rangle$. Esquematicamente, temos:

Destarte, o processo de medida quântica usualmente muda o estado quântico do sistema; sendo que, a única exceção é quando o sistema em questão já se encontra em um dos autoestados do observável sendo medido. Neste caso, o estado permanece o mesmo, e o valor da grandeza física medida é determinado com certeza (com probabilidade P = 1), sendo, pois, o autovalor associado ao dado autoestado.

Em geral, temos a *Probabilidade de Transição de Estados*, ou seja, para um dado sistema inicialmente em $|\alpha\rangle$, após a medida do observável *A*, ocorre a transição para um autoestado $|a'\rangle$ de *A*, resultando em um valor a' da grandeza física sendo medida, com a *Probabilidade de Transição* dada por:

$$Pa' = |\langle a' | \alpha \rangle|^2$$
 (2.3.1);

considerando-se que o estado $|\alpha\rangle$ esteja normalizado. A expressão (2.3.1) representa, portanto, a probabilidade de transição para o estado $|a'\rangle$, dado que o sistema se

encontrava inicialmente em |lpha
angle. Trata-se de um Postulado Fundamental da Mecânica Quântica.

Tal interpretação probabilística, inerente ao processo de medida de um observável A, dá ensejo à definição do Valor Esperado ou Valor Médio de um Observável A, com relação a um estado quântico arbitrário $|\alpha\rangle$, o qual, na notação de Dirac, é expresso por:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\alpha} \equiv \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle$$
 (2.3.2).

Com efeito, a partir das deduções a seguir, é possível vislumbrar que a definição de $\langle \hat{A} \rangle_{\alpha}$ é compatível com o conceito de valor médio ou valor esperado, encontrado na Teoria de Probabilidades para uma variável aleatória X qualquer:

$$\langle X \rangle = \sum_{i=1} x_i P(x_i),$$

em que x_i são os valores discretos assumidos por pela variável aleatória X; e, $P(x_i)$, as probabilidades associadas a cada um dos valores x_i . Assim, tomando-se a expressão da representação de um operador A qualquer (2.2.3.4):

$$\hat{A} = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle\langle a''| \hat{A} |a'\rangle\langle a'|,$$

e, multiplicando-se ambos os lados da igualdade, pelo $bra \langle \alpha |$ à esquerda, e pelo $ket |\alpha\rangle$ à direita, obtemos:

$$\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \sum_{a''} \sum_{a'} \langle \alpha | | a'' \rangle \langle a'' | \hat{A} | a' \rangle \langle a' | | \alpha \rangle$$

$$\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \sum_{a'} \sum_{a'} a' \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

$$\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \sum_{a'} a' \langle \alpha | a' \rangle \cdot 1 \cdot \langle a' | \alpha \rangle = \sum_{a'} a' \langle a' | \alpha \rangle^* \langle a' | \alpha \rangle;$$

sendo que, na segunda passagem, utilizamos a relação de operador sobre autoestado; e, na terceira passagem, a propriedade de ortonormalidade de autoestados e a relação de dualidade do produto interno, de modo que podemos deduzir que:

$$\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \sum_{a'} a' |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = \sum_{a'} a' P a'$$
 (2.3.3).

2.4 OBSERVÁVEIS INCOMPATÍVEIS E RELAÇÃO DE INCERTEZA

Na Mecânica Quântica, em oposição ao que ocorre na Mecânica Clássica, medidas de grandezas físicas distintas, realizadas simultaneamente sobre um dado sistema físico, podem ser *incompatíveis por princípio*, de tal sorte que os resultados de duas medidas efetuadas sobre o sistema obedecem a uma *Relação de Incerteza*, a qual limita a precisão das mesmas, estabelecendo uma desigualdade entre os produtos das incertezas (ou flutuações) das medidas realizadas simultaneamente sobre um sistema que se encontra em um determinado estado quântico.

Inicialmente, definem-se o *Comutador* e o *Anti-Comutador*, de dois Observáveis *A* e *B*, como sendo, respectivamente:

$$\left|\hat{A},\hat{B}\right| \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$
 (2.4.1),

$$\{\hat{A},\hat{B}\}\equiv\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$$
 (2.4.2).

Dois Observáveis quaisquer A e B são ditos compatíveis se:

$$|\hat{A}, \hat{B}| = 0$$
 (2.4.3).

De posse da definição de compatibilidade de observáveis, (2.4.3), podemos enunciar e provar o seguinte:

Teorema: Se A e B são dois observáveis compatíveis, sendo que A não possui autovalores degenerados, então os elementos da matriz $\langle a''|\hat{B}|a'\rangle$ são todos diagonais.

Prova: A partir da definição (2.4.3), temos que:

$$\langle a'' | [\hat{A}, \hat{B}] a' \rangle = (a'' - a') \langle a'' | \hat{B} | a' \rangle = 0$$

de modo que os elementos matriciais $\langle a''|\hat{B}|a'\rangle$ devem desaparecer a menos que a''=a' . Logo,

$$\langle a''|\hat{B}|a'\rangle = \delta_{a'a''}\langle a'|\hat{B}|a'\rangle \quad \Box.$$

Portanto, A e B podem, portanto, ser representados por matrizes diagonais com o mesmo conjunto de *ket*s de base:

$$\hat{B} = \sum_{a''} |a''\rangle\langle a''|\hat{B}|a''\rangle\langle a''|,$$

de modo que:

$$\hat{B}|a'\rangle = \sum_{a''} |a'''\rangle\langle a''|\hat{B}|a'''\rangle\langle a''|a'\rangle = (\langle a'|\hat{B}|a'\rangle)|a'\rangle;$$

com o autovalor de B sendo dado por: $b' = \langle a' | \hat{B} | a' \rangle$; ou seja, $|a' \rangle$ é um autoestado simultâneo de A e de B, $|a' \rangle \equiv |a', b' \rangle$:

$$\hat{A}|a',b'\rangle = a'|a',b'\rangle$$
 (2.4.4)

$$\hat{B}|a',b'\rangle = b'|a',b'\rangle$$
 (2.4.5).

Para caso de degenerescência de grau *n*, ou seja, *n* autoestados com o mesmo autovalor (*n-fold degeneracy*), temos:

$$\hat{A}|a'^{(i)}\rangle = a'|a'^{(i)}\rangle$$
 (2.4.6),

para i = 1, 2, ..., n; em que n é a dimensão do espaço de degenerescência.

A fim de caracterizar as flutuações e as Relações de Incerteza, faz-se necessário, primeiramente, definir o seguinte operador (de *dispersão*):

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$$
 (2.4.7).

Se pensarmos inicialmente na flutuação para uma medida do observável A em um de seus autoestados, temos que:

$$\langle \hat{A} \rangle_{a'} = \langle a' | \hat{A} | a' \rangle = a' \langle a' | a' \rangle = a',$$

de modo que:

$$\Delta \hat{A} |a'\rangle = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{a'}) |a'\rangle = 0.$$

Em qualquer outro caso, a observação de A levará a valores diferentes em diferentes observações. Em um estado genérico $|\psi\rangle$, que não um autoestado de A, os resultados flutuarão em torno do valor médio $\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\!\scriptscriptstyle M}$.

Uma boa medida dessa flutuação, ou incerteza de A em um estado $|\psi\rangle$ é o Desvio Quadrático Médio $\left<(\Delta\hat{A})^2\right>$, definido por:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle (\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A}\rangle + \langle \hat{A}\rangle^2) \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A}\rangle^2$$
 (2.4.8).

Mais explicitamente, deduzindo-o em função de um estado $|\psi\rangle$, temos:

Como consequência direta das definições de Operador Hermiteano e Anti-Hermiteano, do Desvio Quadrático Médio, de Comutador e Anti-Comutador, e dos seguintes lemas:

Lema 1: Desigualdade de Schwarz¹⁰: $\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \ge |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$;

¹⁰ Análoga àquela para as normas de dois vetores **a** e **b** em um espaço euclideano (KREYSZIG, 1989), (ROMAN, 2007).

-

Lema 2 : O valor esperado de um operador hermiteano é *puramente real* (decorrência da condição de realidade dos autovalores de um operador hermiteano);

Lema 3 : O valor esperado de um operador *anti-hermiteano*, definido como $C = -C^{\dagger}$, é *puramente imaginário* (deduzida a partir das relações de dualidade);

pode-se deduzir que:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle_{\psi} \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle_{\psi} \ge \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_{\psi}|^2$$
 (2.4.10);

que é a *Relação de Incerteza na Mecânica Quântica*: se *A* e *B* não comutam, não é possível tornar, ao mesmo tempo, tão pequenas quanto se queira, as incertezas na determinação das grandezas físicas associadas aos observáveis *A* e *B*.

Como conseqüência da *Relação de Incerteza*, a determinação simultânea, com precisão arbitrária, de duas grandezas físicas diferentes pode ser *incompatível*, ou seja, impossível por princípio.

Destarte, *Compatibilidade*, no formalismo quântico, equivale, portanto, à *Comutabilidade* dos observáveis físicos envolvidos.

2.5 ESPECTRO CONTÍNUO DE AUTOVALORES

2.5.1 Caso Unidimensional. Autoestados e Medidas de Posição e de Momento.

Podemos estender todo o formalismo desenvolvido, até então para grandezas físicas com um espectro discreto de autovalores, para grandezas físicas que possuam um espectro contínuo de autovalores, ou seja, para um Espaço de Hilbert de dimensão infinita.

Por exemplo, vejamos a relação operador, autovetor e autovalor para um observável contínuo qualquer ξ :

$$\left| \hat{\xi} \right| \left| \xi' \right\rangle = \left| \xi' \right| \left| \xi' \right\rangle$$
 (2.5.1.1),

em que o $ket |\xi'\rangle$ é um autoestado do operador ξ .

Podemos, então, estabelecer as correspondências:

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''} \rightarrow \langle \xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi'-\xi'')$$
 (2.5.1.2);

$$\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = \hat{1} \rightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle\langle \xi'| = \hat{1} \qquad (2.5.1.3);$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'} ca'|a'\rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi'|\xi'\rangle\langle \xi'|\alpha\rangle \qquad (2.5.1.4);$$

$$\sum_{\alpha'} \left| \left\langle \alpha' \right| \alpha \right\rangle \right|^2 = \sum_{\alpha'} P \alpha' = 1 \to \int d\xi' \left| \left\langle \xi' \right| \alpha \right\rangle \right|^2 = 1 \qquad (2.5.1.5);$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | \alpha \rangle = \int d\xi' \langle \beta | \xi' \rangle \langle \xi' | \alpha \rangle \qquad (2.5.1.6);$$

$$\langle a''|\hat{A}|a'\rangle = a'\delta_{a'a''} \rightarrow \langle \xi''|\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi'\delta(\xi''-\xi') \qquad (2.5.1.7).$$

Como primeiro exemplo de observável com espectro contínuo de autovalores, consideremos o *Operador de Posição* \hat{x} , o qual satisfaz, naturalmente, a relação de autovalor-autoestado:

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$$
 (2.5.1.8).

Novamente, pode-se expandir um estado quântico $|\alpha\rangle$ qualquer em termos da base $\{|x'\rangle\}$, de dimensão infinita, dos autoestados da posição, como se segue:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$
 (2.5.1.9).

Considerando-se uma medida idealizada do observável posição \hat{x} através de um detector hipotético, o mesmo registra um 'click' apenas quando a partícula está precisamente na posição x', e em nenhum outro lugar. Na prática, um tal instrumento detecta a partícula quando a mesma é observada em algum intervalo estreito [x' - $\Delta/2$, x' + $\Delta/2$]. Quando um 'click' (registro de contagem) é obtido, o estado muda abruptamente como se segue:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x'' |\alpha\rangle \rightarrow medida\hat{x} \rightarrow \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx'' \hat{x} |x''\rangle \langle x'' |\alpha\rangle = x'' \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx'' |x''\rangle \langle x'' |\alpha\rangle;$$

assumindo que $\langle x''|\alpha\rangle$ não muda apreciavelmente no intervalo estreito Δ , a probabilidade de registrar a partícula no mesmo é:

$$P_{\Delta} = \left| \left\langle x' \middle| \alpha \right\rangle \right|^2 dx'$$
 (2.5.1.10),

considerando-se, aqui, $\Delta \approx dx'$, ou seja, $P_\Delta = \left| \left\langle x' \middle| \alpha \right\rangle \right|^2 dx'$ é a probabilidade de detecção da partícula em um intervalo infinitesimal. Tal definição é análoga à probabilidade de transição de estados $Pa' = \left| \left\langle a' \middle| \alpha \right\rangle \right|^2$.

Considerando-se um estado $|\alpha\rangle$ normalizado, pela expressão de expansão (2.5.1.9), temos que:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x' | \alpha \rangle^* \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' | \langle x' | \alpha \rangle |^2 = 1;$$

sendo o objeto $\langle x'|\alpha\rangle$ por definição:

$$\langle x' | \alpha \rangle \equiv \psi_{\alpha}(x')$$
 (2.5.1.11).

Assim, no formalismo quântico, expresso através da notação de Dirac, observamos imediatamente a correspondência do objeto $\langle x'|\alpha\rangle$ com a *função de onda* $\psi_{\alpha}(x')$, para o dado sistema no estado quântico $|\alpha\rangle$, com a qual estamos familiarizados a partir da Mecânica Ondulatória. Trata-se, pois, da função de onda para o sistema no estado $|\alpha\rangle$, na representação do espaço de posições x'.

Com efeito, seja a expansão conhecida: $|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$. Usando a linguagem de funções de onda, se multiplicarmos ambos os lados da igualdade pelo *bra* de posição $\langle x'|$, obtemos:

$$\langle x' | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle x' | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle$$
,

expressão esta, a qual podemos reconhecer da Mecânica Ondulatória como sendo:

$$\psi_{\alpha}(x') = \sum_{a'} c_{a'} u_{a'}(x')$$
 (2.5.1.12);

ou seja, (2.5.1.12) representa a expansão da função de onda em termos de autofunções do operador A.

No tocante ao espaço tridimensional, $|x'\rangle$ é um autoestado simultâneo dos observáveis \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} : $|x'\rangle \equiv |x',y',z'\rangle$, de sorte que temos as seguintes relações:

$$\hat{x}|x', y', z'\rangle = x'|x', y', z'\rangle$$
 (2.5.1.13);

$$\hat{y}|x', y', z'\rangle = y'|x', y', z'\rangle$$
 (2.5.1.14);

$$\hat{z}|x', y', z'\rangle = z'|x', y', z'\rangle$$
 (2.5.1.15);

bem como a expansão de $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$
 (2.5.1.16);

e, por fim, a relação de comutação:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$$
 (2.5.1.17),

a qual expressa o fato de que os observáveis de posição, em suas diferentes componentes x, y e z, são compatíveis entre si, ou seja, é possível medir simultaneamente as componentes do vetor de posição x.

A fim de encontrarmos o observável quântico correspondente à grandeza física momento linear, ou seja, para estabelecermos *Operador Momento Linear*, precisamos primeiramente definir e caracterizar um *Operador de Translação Infinitesimal*, cuja ação em um *ket* de espaço seja da forma:

$$\hat{\tau}(dx')|x'\rangle = |x'+dx'\rangle$$
 (2.5.1.18);

de sorte que sua atuação em um estado $|\alpha\rangle$ traduza-se por:

$$\begin{split} \hat{\tau}(dx')\big|\alpha\big> &= \hat{\tau}(dx')\int dx'\big|x'\big>\big< x'\big|\alpha\big> = \int dx'\big|x'+dx'\big>\big< x'\big|\alpha\big> = \\ &= \int dx'\big|x'\big>\big< x'-dx'\big|\alpha\big> \Rightarrow x' \to x'-dx'. \end{split}$$

Ademais, tal operador deve também gozar das seguintes propriedades:

- i) Unitariedade: $\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{\tau}^{\dagger}(dx') \hat{\tau}(dx') | \alpha \rangle \Leftrightarrow \hat{\tau}^{\dagger}(dx') \hat{\tau}(dx') = \hat{1};$
- ii) Composição: $\hat{\tau}(dx'')\hat{\tau}(dx') = \hat{\tau}(dx'+dx'')$;
- iii) *Translação Reversa*: $\hat{\tau}(-dx') = \hat{\tau}^{-1}(dx')$;
- iv) Translação Nula: $\lim_{dx'\to 0} \hat{\tau}(dx') = \hat{1}$.

O seguinte operador de translação infinitesimal satisfaz todas as propriedades anteriores:

$$\hat{\tau}(dx') = 1 - i\vec{K}.d\vec{x}$$
 (2.5.1.19);

em que, $\mathbf{K} = (K_x K_y K_z)$, cujas componentes são, cada uma delas, individualmente, operadores hermiteanos.

Através das propriedades algébricas de $\hat{\tau}(dx')$ e de $\textbf{\textit{K}}$, mostra-se (SAKURAI, 1994) que são válidas as relações de comutação:

$$[\hat{x}, \hat{\tau}(dx')] = dx'$$
 (2.5.1.20);

$$\left[\hat{x}_{i},K_{i}\right]=i\delta_{ij}\qquad(2.5.1.21).$$

Como pode ser, então, o operador K identificado com o *Operador Momento* propriamente dito? Em primeiro lugar, K deve ter dimensão de [1/comprimento], pois K.dx deve ser adimensional, de acordo com a expressão (2.5.1.19). Destarte, podemos definir K como sendo: K = p / (constante universal com dimensão de ação).

A constante que aparece no denominador da expressão anterior é: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, a qual aparece na relação de de Broglie (1924):

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$
 (2.5.1.22);

na qual, λ é o comprimento de onda associado à partícula quântica. Assim, K é o operador na Mecânica Quântica que corresponde ao 'número de onda' k da Mecânica Clássica.

Portanto, com base nesses raciocínios de ordem física, ficamos com a seguinte expressão para o *operador de translação infinitesimal*:

$$\hat{\tau}(dx') = 1 - i\vec{p}.d\vec{x}/\hbar$$
 (2.5.1.23);

de modo que a relação de comutação (2.5.1.21) - $\left[\hat{x}_i, K_j\right] = i\delta_{ij}$ - adquire a forma:

$$|\hat{x}_i, \hat{p}_i| = i\hbar \delta_{ii}$$
 (2.5.1.24);

de modo que, a partir dessa última expressão, (2.5.1.24), e da Relação de Incerteza (2.4.10), deduzida na Seção anterior, $\left\langle (\Delta \hat{A})^2 \right\rangle_{\psi} \left\langle (\Delta \hat{B})^2 \right\rangle_{\psi} \geq \frac{1}{4} \left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\rangle_{\psi} \right|^2$, somos levados a:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \ge \frac{\hbar^2}{4}$$
 (2.5.1.25),

que é a célebre Relação de Incerteza de Heisenberg de Momento-Posição.

Ainda, como decorrência das propriedades algébricas e de comutação dos Operadores de Translação Infinitesimal e Momento (SAKURAI, 1994), temos que é válida a relação:

$$|\hat{p}_i, \hat{p}_i| = 0$$
 (2.5.1.26);

ou seja, as componentes do *Operador Momento Linear* são observáveis compatíveis entre si, de modo que é possível medir o vetor momento linear sem as incertezas inerentes à Relação de Incerteza (2.5.1.25).

As relações (2.5.1.17), (2.5.1.24) e (2.5.1.26) são conhecidas como as *Relações Fundamentais* (ou Canônicas) de Comutação da Mecânica Quântica.

Prossigamos com a dedução da expressão do operador momento na base dos estados de posição. Com efeito, pode-se deduzir tal representação do operador momento, quando os autoestados de posição são empregados como base. Assim, aplicando-se a expressão obtida para o operador de translação (2.5.1.23) em um estado $|\alpha\rangle$, expandido em termos dos autoestados de posição $|x'\rangle$, obtemos:

$$\begin{split} \left(1 - \frac{ip\Delta x'}{\hbar}\right) |\alpha\rangle &= \int dx' \,\hat{\tau}(\Delta x') |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle \langle x' + \Delta x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle \langle x' - \Delta x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle \langle (x'|\alpha) - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle) \,. \end{split}$$

Comparado-se ambos os lados da igualdade, resulta:

$$\hat{p}|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle) \Rightarrow \langle x'|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle;$$

sendo que foi empregada a propriedade da ortogonalidade $\langle x''|x'\rangle = \delta(x''-x')$ na última passagem. Assim, o operador momento correspondente na Mecânica Quântica, em termos dos autoestados de posição $|x'\rangle$, é:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \qquad (2.5.1.27).$$

De forma natural, calculamos o *Valor Esperado do Momento*, para um estado quântico $|\alpha\rangle$, como:

$$\langle \hat{p} \rangle_{\alpha} = \langle \alpha | \hat{p} | \alpha \rangle = \int dx' \langle \alpha | x' \rangle (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}) \langle x' | \alpha \rangle =$$

$$= \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}) \langle x' | \alpha \rangle) =$$

$$\langle \hat{p} \rangle_{\alpha} = \int dx' \psi_{\alpha}^{*}(x') (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}) \psi_{\alpha}(x')$$
 (2.5.1.28).

Pode-se formular todas as relações vistas, anteriormente, em termos do *espaço* das *posições*, de forma análoga, valendo-se, para tanto, do *espaço* dos *momentos*. Com efeito, há uma simetria entre os espaços do momento e da posição. Destarte, temos as relações:

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \qquad (2.5.1.29);$$

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'') \qquad (2.5.1.30);$$

$$|\alpha\rangle = \int dp'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle \qquad (2.5.1.31);$$

$$\langle p'|\alpha\rangle = \phi_{\alpha}(p') \qquad (2.5.1.32);$$

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = 1 \Leftrightarrow \int dp'\langle \alpha|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int dp'|\phi_{\alpha}(p')|^2 = 1 \qquad (2.5.1.33);$$

dado que, nas relações (2.5.1.32) e (2.5.1.33), o objeto $\langle p'|\alpha\rangle \equiv \phi_{\alpha}(p')$ corresponde à função de onda $\phi_{\alpha}(p')$, relativa ao estado $|\alpha\rangle$, na representação dos momentos.

Podemos definir também uma *Função de Transformação* entre os espaços ${\bf x}$ e ${\bf p}$ - $\langle x'|\,p'\rangle$:

$$\langle x'|\hat{p}|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|p'\rangle \Rightarrow p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|p'\rangle \quad (2.5.1.34).$$

A solução desta equação diferencial $p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle$ para $\langle x'|p'\rangle$ é:

$$\langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip' x'}{\hbar}\right)$$
 (2.5.1.35).

De posse da expressão da função de transformação (2.5.1.35), podemos reescrever as expansões seguintes:

i)
$$\langle x' | \alpha \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle$$
 (2.5.1.36);

ii)
$$\langle p' | \alpha \rangle = \int dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle$$
 (2.5.1.37);

como:

iii)
$$\psi_{\alpha}(x') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right] \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_{\alpha}(p')$$
 (2.5.1.38);

iv)
$$\phi_{\alpha}(p') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right] \int dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right) \psi_{\alpha}(x')$$
 (2.5.1.39);

de modo que, (2.5.1.38) e (2.5.1.39) relacionam as funções de onda $\psi_{\alpha}(x')$ e $\phi_{\alpha}(p')$, em um estado $|\alpha\rangle$, as quais são, respectivamente, as funções de onda na representação das posições e na representação dos momentos. Tais supracitadas expressões mantêm entre si correlações de transformação e anti-transformação análogas àquelas encontradas na teoria de transformadas de Fourier.

2.5.2 Caso Tridimensional. Autoestados e Medidas de Posição e de Momento

Pode-se generalizar, imediata e trivialmente, para três dimensões, todas as relações vistas para o caso unidimensional. As mesmas são sintetizadas abaixo.

i)
$$\hat{x}|x',y',z'\rangle = x'|x',y',z'\rangle$$
;

ii)
$$\hat{y}|x', y', z'\rangle = y'|x', y', z'\rangle$$
;

iii)
$$\hat{z}|x',y',z'\rangle = z'|x',y',z'\rangle$$
;

iv)
$$\hat{p}_x | p_x', p_y', p_z' \rangle = p'_x | p_x', p_y', p_z' \rangle;$$

$$V) \quad \hat{p}_{y} | p_{x}', p_{y}', p_{z}' \rangle = p'_{y} | p_{x}', p_{y}', p_{z}' \rangle;$$

vi)
$$\hat{p}_z | p_x', p_y', p_z' \rangle = p'_z | p_x', p_y', p_z' \rangle;$$

vii)
$$\langle x'|x''\rangle = \delta^3(x'-x'')$$
; com $\delta^3(x'-x'') = \delta(x'-x'') \delta(y'-y'') \delta(z'-z'')$;

viii)
$$\langle p' | p'' \rangle = \delta^3(p'-p'')$$
; com $\delta^3(\boldsymbol{p'}-\boldsymbol{p''}) = \delta(p_x'-p_x'') \delta(p_y'-p_y'') \delta(p_z'-p_z'')$;

ix)
$$\int d^3x' |x'\rangle\langle x'| = \hat{1};$$

$$x) \quad \int d^3 p' |p'\rangle \langle p'| = \hat{1};$$

xi)
$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$
;

xii)
$$|\alpha\rangle = \int d^3 p' |p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle;$$

xiii)
$$\langle \hat{p} \rangle_{\alpha} = \int d^3 x' \psi_{\alpha}^*(x', y', z') (-i\hbar \nabla) \psi_{\alpha}(x', y', z');$$

em que o operador de diferenciação em x' passa a ser o operador "nabla";

xiv)
$$\langle x'|p'\rangle = \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\right) \exp\left(\frac{i'(px'-py'-pz').(x'-y'-z')}{\hbar}\right);$$

que é a função de transformação $\langle x'|p'\rangle$ entre os espaços x' e p' para o caso tridimensional.

2.6 INTRODUÇÃO À DINÂMICA QUÂNTICA

Até agora, levou-se em conta apenas estados quânticos que não variavam no tempo. O propósito da presente seção é estudar como se dá a evolução temporal na Mecânica Quântica, ou seja, como os estados físicos e/ou os operadores evoluem no tempo. Dentro do formalismo da Mecânica Quântica, há duas abordagens possíveis ¹¹ no tocante à Dinâmica Quântica. Na abordagem dita de Schrödinger, os estados têm dependência temporal e evoluem segundo à equação que leva o seu nome; ao passo que na abordagem de Heisenberg, os operadores é que são dependentes do tempo e atuam em estados quânticos fixos.

2.6.1 Dinâmica Quântica na Representação de Schrödinger

De modo geral, dado um estado quântico qualquer, podemos pensar na sua evolução temporal como se segue:

$$|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \rightarrow evolução(t) \rightarrow |\alpha, t_0; t\rangle;$$

ou seja, um estado inicial $|\alpha,t_0\rangle$, no instate $t=t_0$, é levado ao estado $|\alpha,t_0;t\rangle$ para um instante t qualquer.

¹¹ Há ainda a formulação da Dinâmica Quântica por meio de Integrais de Trajetória, que somam infinitas transições temporais de estado infinitesimais. Tal abordagem dinâmica será vista mais adiante, na Seção 2.6.3.

Como no caso da translação espacial, podemos pensar, de forma análoga, em kets que sofrem a ação de um *Operador de Evolução Temporal U(t,t₀)*, de sorte sua atuação pode ser expressa como se segue:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle$$
 (2.6.1.1).

Considerando-se uma expansão do tipo:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} ca'(t_0)|a'\rangle$$
 (2.6.1.2);

temos que, uma vez que haja decorrido um certo tempo, um estado $|\alpha,t_0;t\rangle$ da forma:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} ca'(t) |a'\rangle$$
 (2.6.1.3).

De modo geral, os módulos dos coeficientes individuais de expansão não permanecem os mesmos, ou seja: $|ca'(t)| \neq |ca'(t_0)|$. Não obstante, se o estado físico inicial $|\alpha,t_0\rangle$ estiver normalizado, podemos esperar que: $\sum_{a'} |ca'(t_0)|^2 = \sum_{a'} |ca'(t)|^2$, ou seja, as somas dos módulos ao quadrado dos coeficientes de expansão devem permanecer iguais. Ou, equivalentemente, $\langle \alpha,t_0|\alpha,t_0\rangle=1 \Rightarrow \langle \alpha,t_0;t|\alpha,t_0;t\rangle=1$, uma vez que a evolução temporal deve promover uma conservação das probabilidades.

Para tanto, o *Operador de Evolução Temporal* deve ter, como primeira propriedade, a *Unitariedade*, na medida em que *unitariedade* equivale à conservação de probabilidades:

i) Unitariedade: $\hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = \hat{1}$.

Ademais, $U(t,t_0)$ deve ainda gozar da propriedade de:

ii) Composição (para $t_2 > t_1 > t_0$): $\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)$.

É oportuno também se definir um *operador infinitesimal* $\hat{U}(t_0+dt,t_0)$ tal que:

iii)
$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) \rightarrow |\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle = \hat{U}(t_0 + dt, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$
;

e que tenha ainda a propriedade de

iv) Continuidade:
$$\lim_{dt\to 0} \hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{1}$$
;

ou seja, reduzir-se ao *operador identidade* quando *dt* tender a zero.

Esses requerimentos são satisfeitos por um operador da forma:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt$$
 (2.6.1.4);

no qual, Ω é hermiteano: Ω^t = Ω.

No afã de definir o *Operador de Evolução Temporal* adequado, levam-se em conta três fatos físicos:

- a) o operador Ω tem dimensão de frequência (inverso do tempo);
- b) a Freqüência está relacionada à Energia, tal como é expresso pela relação de Planck-Einstein: $E = \hbar \omega$;
- c) e, tomando-se emprestado, do formalismo da Mecânica Clássica, a idéia de que a função *Hamiltoniana* é o *gerador da evolução temporal* (assim como o momento linear é o gerador da translação espacial), é natural, então, relacionar Ω com o operador

Hamiltoniano: $\hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar}$, de sorte que podemos, assim, escrever o *Operador de Evolução* Temporal Infinitesimal como:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}$$
 (2.6.1.5).

Estamos, agora, em condições de derivar a equação diferencial fundamental para o operador de evolução temporal $U(t,t_0)$. A partir da propriedade de composição do operador, fazendo-se: $t_1 \to t$, e $t_2 \to t + dt$ na expressão $\hat{U}(t_2,t_0) = \hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0)$, temos que:

$$\hat{U}(t+dt,t_0) = \hat{U}(t+dt,t)\hat{U}(t,t_0) = (1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar})\hat{U}(t,t_0),$$

seguindo-se imediatamente que:

$$\hat{U}(t+dt,t_0) - \hat{U}(t,t_0) = -i \left(\frac{\hat{H}}{\hbar}\right) dt \hat{U}(t,t_0)$$
 (2.6.1.6).

Escrevendo a relação anterior (2.6.1.6) na forma de uma equação diferencial, temos então:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (2.6.1.7),$$

que é a *Equação de Schrödinger* para o Operador de Evolução Temporal: ou seja, o mesmo deve, necessariamente, obedecê-la.

Esta equação conduz diretamente à *Equação de Schrödinger* para um estado quântico dado por um $ket \mid \alpha, t_0 \rangle$: basta multiplicar ambos os lados da igualdade (2.6.1.7) por $\mid \alpha, t_0 \rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t,t_0) |\alpha,t_0\rangle = \hat{H}\hat{U}(t,t_0) |\alpha,t_0\rangle \Rightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = \hat{H} |\alpha, t_0; t\rangle$$
 (2.6.1.8).

No caso em que o *Operador Hamiltoniano* é independente do tempo, pode-se mostrar facilmente, através de uma expansão da exponencial de uma matriz, que o Operador $U(t,t_0)$ tem a forma:

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right)$$
 (2.6.1.9).

Consideremos, agora, o seguinte caso especial. Se os autoestados de um observável A são os mesmos do *Operador Hamiltoniano*, então tais autoestados simultâneos são chamados de "autoestados de energia", de sorte que vale a relação de comutação $\left[\hat{A},\hat{H}\right]=0$. Os autovalores correspondentes são denotados por Ea', de modo que se verifica a relação de autoestado e autovalor:

$$\hat{H}|a'\rangle = Ea'|a'\rangle$$
 (2.6.1.10).

Supondo-se agora uma expansão inicial no tempo do tipo (2.6.1.2):

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} ca'(t_0)|a'\rangle;$$

temos, assim, que sua evolução temporal se dá na forma:

$$|\alpha, t_{0}; t\rangle = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t - t_{0})}{\hbar}\right) |\alpha, t_{0}| = 0 = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \alpha \rangle \exp\left(\frac{-iEa't}{\hbar}\right) =$$

$$= \sum_{a'} ca'(t = 0) \exp\left(\frac{-iEa't}{\hbar}\right) |a'\rangle$$

$$|\alpha, t_{0}; t\rangle = \sum_{a'} ca'(t = 0) \exp\left(\frac{-iEa't}{\hbar}\right) |a'\rangle \qquad (2.6.1.11);$$

em que, aferimos a atuação direta do *Operador Hamiltoniano* sobre o autoestado de energia, resultando em uma função exponencial que depende do tempo e dos autovalores *Ea*'.

Tratemos agora a Equação de Schrödinger, dependente do tempo, sob o viés de equação de onda. No formalismo desenvolvido até aqui, seja uma função de onda associada a um estado quântico $|\alpha\rangle$, na representação da posição \mathbf{x} , e que é dependente de \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} e \mathbf{t} .

$$\psi_{\alpha}(x', y', z', t) = \langle x', y', z' | \alpha, t_0; t \rangle$$
 (2.6.1.12).

Enquanto função do tempo, $|\alpha,t_0;t\rangle$ é um ket de estado na representação de Schrödinger, ao passo que $\langle x'|=\langle x',y',z'|$ é um 'eigenbra' de posição, independente do tempo, com autovalor \mathbf{x} '.

Tomando-se um Operador Hamiltoniano da forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x', y', z')\hat{\mathbf{l}}$$
 (2.6.1.13),

em que $V(\mathbf{x})$ é tal que $\langle x''|V(x)|x'\rangle = V(x')\delta^3(x'-x'')$; e $V(\mathbf{x'})$ é uma função real de $\mathbf{x'}$, e não mais um operador. E, escrevendo-se a Equação de Schrödinger (valendo-se do fato de que os *bras* de posição são independentes do tempo):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x', y', z' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle x', y', z' | \hat{H} | \alpha, t_0; t \rangle$$
 (2.6.1.14);

para a qual, consideremos, primeiramente, a contribuição da energia cinética do hamiltoniano (2.6.13) no lado direito da equação:

$$\langle x', y', z' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \alpha, t_0; t \rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla^{2} \langle x', y', z' | \alpha, t_0; t \rangle$$
 (2.6.1.15);

e, agora, para o potencial V(x), temos diretamente:

$$\langle x', y', z' | V(x', y', z') \hat{1} = \langle x', y', z | V(x', y', z')$$
 (2.6.1.16);

de modo a considerar sua atuação no bra de posição.

Combinando as duas passagens anteriores (2.6.1.15) e (2.6.1.16), reescrevemos (2.6.1.14) como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x', y', z' | \alpha, t_0; t \rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla^{2} \langle x', y', z' | \alpha, t_0; t \rangle + V(x', y', z') \langle x', y', z' | \alpha, t_0; t \rangle$$
 (2.6.1.17);

de sorte que, a partir de (2.6.1.17), reconhecemos imediatamente a Equação de Onda de Schrödinger, em três dimensões e dependente do tempo, em termos da função de onda para um estado quântico $|\alpha\rangle$, expressa na representação das posições x':

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\alpha}(x', y', z', t) = -\left(\frac{\hbar^{2}}{2m}\right) \nabla^{2} \psi_{\alpha}(x', y', z', t) + V(x', y', z') \psi_{\alpha}(x', y', z', t)$$
 (2.6.1.18).

Por fim, vamos nos ater, agora, à interpretação física da função de onda. A grandeza $\rho(\mathbf{x}',t)$ definida por:

$$\rho(x', y', z', t) = \left| \left\langle x', y', z' \middle| \alpha, t_0; t \right\rangle \right|^2 = \left| \psi_{\alpha}(x', y', z', t) \right|^2$$
 (2.6.1.19)

é considerada uma *Densidade de Probabilidade*. Com efeito, a probabilidade de se encontrar uma partícula em um volume infinitesimal d^3x , centrado em x, em um dado tempo t é dada por:

$$\rho(x',t)d^3x'$$
 (2.6.1.20).

A partir da Equação de Onda de Schrödinger dependente do tempo, expressão (2.6.1.18), é possível derivar diretamente a *Equação de Continuidade*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0 \qquad (2.6.1.21),$$

na qual, $\rho(\mathbf{x}',t) = |\psi|^2$ - expressão (2.6.1.19), e a grandeza $\mathbf{j}(\mathbf{x}',t)$, conhecida como *Fluxo* de *Probabilidade*, é dada por:

$$j(x',t) = -\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi\right] \qquad (2.6.1.22).$$

No contexto da Mecânica Quântica, fisicamente falando, a grandeza j(x',t) e a Equação da Continuidade a ela associada, estão associadas à conservação da probabilidade, analogamente à conservação da carga elétrica na Eletrodinâmica, e à conservação da massa na Mecânica dos Fluidos.

Com efeito, integrando-se $\mathbf{j}(\mathbf{x}',t)$ em um volume de contorno, obtêm-se o valor esperado do momento em um dado tempo t dividido pela massa m da partícula:

$$\int d^3x' j(x',t) = \frac{\langle \hat{p} \rangle_t}{m}$$
 (2.6.1.23).

2.6.2 Dinâmica Quântica na Representação de Heisenberg

Na seção anterior, foi introduzido o conceito de dinâmica considerando-se a atuação do operador de evolução temporal sobre os *ket*s de estado (auto-estados). Tal abordagem, na Dinâmica Quântica, é conhecida como Representação de Schrödinger. Com efeito, o operador de evolução temporal, como era de se esperar, satisfaz a equação de Schrödinger.

Outra formulação possível, com relação à Dinâmica Quântica, consiste, no entanto, em considerar que, os observáveis quânticos, e não os estados, é que variam com o tempo. Tal abordagem é conhecida como Representação de Heisenberg.

Recordemos, inicialmente, a atuação de operadores unitários sobre *bras* e *kets* de estado:

$$\langle \beta | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | \hat{U}^{\dagger} \hat{U} | \alpha \rangle = \langle \beta | \hat{I} | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle$$
;

ou seja, sob uma transformação unitária, o produto interno de um *bra* e um *ket* permanece inalterado.

Valendo-se deste fato, de que estas transformações afetam os $\it kets$ de estado (ou $\it bras$) de estado, mas não os operadores, pode-se inferir como $\langle \beta | \hat{X} | \alpha \rangle$ deve mudar:

$$\langle \beta | \hat{X} | \alpha \rangle \rightarrow (\langle \beta | \hat{U}^{\dagger}) \cdot \hat{X} \cdot (\hat{U} | \alpha \rangle) = \langle \beta | (\hat{U}^{\dagger} \hat{X} \hat{U}) \alpha \rangle;$$

relação esta, que se segue do axioma associativo da multiplicação. De um ponto de vista físico, esta identidade matemática sugere duas abordagens para as transformações unitárias:

- 1. $|lpha
 angle
 ightarrow \hat{U}|lpha
 angle$ (2.6.2.1): com operadores inalterados; e
- 2. $\hat{X} \rightarrow \hat{U}^{\dagger} \hat{X} \hat{U}$ (2.6.2.2), com os *ket*s de estado inalterados.

Na Representação de Schrödinger, os operadores correspondentes a observáveis físicos, como \hat{x} , \hat{p}_y e \hat{S}_z , são fixos no tempo, enquanto os *kets* de estado variam com o tempo, conforme já visto. Em contrapartida, na Representação de Heisenberg, os Operadores correspondentes aos Observáveis Quânticos variam com o tempo, e os kets de estado são fixos, como se estivessem em t_0 .

Consideremos o operador de evolução temporal $\hat{U}(t,t_0)$, impondo-se $t_0=0$, por razões de simplicidade:

$$\hat{U}(t, t_0 = 0) \equiv \hat{U}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)$$
 (2.6.2.3),

Motivado pela expressão (2.6.2.2), ou, "Abordagem 2", definimos o observável na Representação de Heisenberg por:

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}^{(S)}\hat{U}(t)$$
 (2.6.2.4);

em que, as notações (H) e (S) correspondem a operadores de Heisenberg e de Schrödinger, respectivamente.

Em t=0, o observável de Heisenberg e o correspondente de Schrödinger coincidem:

$$\hat{A}^{(H)}(0) = \hat{A}^{(S)}$$
 (2.6.2.5).

Os kets de estado também coincidem, na representação de Heisenberg, para t = 0 e para tempos t posteriores:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_{H} = |\alpha, t_0 = 0\rangle$$
 (2.6.2.6);

sendo, pois, fixos, ou independentes no tempo.

Em contrapartida, o ket de estado na representação de Schrödinger, conforme já visto, escreve-se como:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_S = \hat{U}(t)|\alpha, t_0 = 0\rangle.$$

O valor esperado $\left<\hat{A}\right>$, de um observável qualquer, é, naturalmente, o mesmo em ambas as representações:

$$\left\langle \alpha,t_{0}=0;t\left|\hat{A}^{(S)}\right|\alpha,t_{0}=0;t\right\rangle _{S}=\left\langle \alpha,t_{0}\left|\hat{U}^{\dagger}\hat{A}^{(S)}\hat{U}\right|\alpha,t_{0}=0\right\rangle =\left\langle \alpha,t_{0}=0;t\right|\hat{A}^{(H)}\left|\alpha,t_{0}=0;t\right\rangle _{H}.$$

Estamos em condições, agora, de derivar a equação fundamental de movimento na representação de Heisenberg da Dinâmica Quântica. Assumindo que $A^{(s)}$ não depende explicitamente do tempo, o que é, de fato o caso na maioria das situações físicas de interesse, obtêm-se através da diferenciação de (2.6.2.4), $\hat{A}^H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}^{(s)} \hat{U}(t)$:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^{H}(t) = \frac{\partial \hat{U}^{\dagger}(t)}{\partial t}\hat{A}^{(S)}\hat{U}(t) + \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}^{(S)}\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} =$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} + \frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} =$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\Big[\hat{A}^{(H)},\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{U}\Big] \qquad (2.6.2.7);$$

sendo que, na segunda passagem, foi usado o fato de que $\,\hat{U}\hat{U}^\dagger = \widehat{1}\,.$

Para o Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0)$, o qual obedece, naturalmente, a Equação de Schrödinger, podemos escrevê-la nas seguintes formais duais:

$$\frac{\partial \hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{U}(t,t_0) \qquad \text{(2.6.2.8a)};$$

$$\frac{\partial \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{U}^{\dagger}(t,t_0) \hat{H} \qquad (2.6.2.8b);$$

Como \hat{H} foi introduzido originalmente na Representação de Schrödinger, somos conduzidos a definir:

$$\hat{H}^{(H)} \equiv \hat{U}^{\dagger} \hat{H} \hat{U} \quad \text{(2.6.2.9)};$$

de acordo com $\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}^{(S)}\hat{U}(t)$. No entanto, em sistemas, nos quais $\hat{U}(t)$ é dado por: $\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)$, os operadores $\hat{U}(t)$ e \hat{H} obviamente comutam, e, como resultado, obtemos:

$$\widehat{U}^{\dagger}\widehat{H}\widehat{U} = \widehat{H}$$
 (2.6.2.10);

de modo que, então, é correto escrever a equação (2.6.2.7) como:

$$\frac{d\hat{A}^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}^{(H)}, \hat{H} \right] \qquad (2.6.2.11).$$

Essa equação é conhecida como a Equação de Movimento de Heisenberg.

Destaquemos, aqui, por fim, que ela foi derivada utilizando-se apenas as propriedades do Operador de Evolução Temporal e a equação que define $\hat{A}^{(H)}$.

2.6.3 Formulação da Dinâmica Quântica através de Integrais de Trajetória

"Thirty-one years ago, Dick Feynman told me about his 'sum over histories' version of Quantum Mechanics. 'The electron does anything it likes', he said. 'It goes in any direction at any speed, forward or backward in time, however it likes, and then you add up the amplitudes and it gives you the wave function'. I said to him, 'you're crazy'. But he wasn't."

Freeman J. Dyson

O físico estadunidense Richard P. Feynman propôs, ao final da década de 40, uma reformulação da Mecânica Quântica, na qual as transições temporais de estados se dão através de Integrais Funcionais de Trajetória, que somam infinitas transições de estado infinitesimais (FEYNMAN, 1948). Motivada, em parte, pelo análogo clássico da integral de ação, e também por buscar uma teoria de quantização aplicável quando se dispusesse apenas da lagrangiana do sistema e não de sua hamiltoniana, o formalismo das integrais de trajetória na Mecânica Quântica mostrou-se extremamente valioso do ponto de vista conceitual e teórico, na medida em que, partindo-se de poucos pressupostos físicos, em especial, o princípio da superposição (usado na soma das contribuições de todas as trajetórias possíveis) e a unitariedade da evolução dinâmica quântica (usada na composição de transições de amplitude) - se conhecemos a amplitude para cada segmento infinitesimal da trajetória, então as multiplicamos todas para obter a amplitude de probabilidade da trajetória inteira, foi possível obter um formalismo equivalente à formulação usual da Mecânica Quântica, de modo que nos

leva a questionar se seria realmente possível construir uma teoria alternativa igualmente bem sucedida na descrição dos fenômenos em escala microscópica.

Do ponto de vista operacional, métodos baseados em integrais de trajetória têm se revelado como extremamente úteis e poderosos em outros ramos da Física Moderna, tais como na Teoria Quântica de Campos, na Mecânica Estatística e na Física da Matéria Condensada, encontrando grande aplicabilidade nestes e também em outros campos (SCHULMAN, 2005), (KLEINERT, 2009).

É instrutivo levar a cabo aqui uma dedução ¹² da integral funcional de trajetória, pois, através dela, é possível apreciar os conceitos físicos envolvidos neste formalismo.

Seja o Operador Unitário de Evolução Temporal da Mecânica Quântica, dado pela expressão (2.6.1.9), a qual é reproduzida a seguir:

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$$
 (2.6.3.1).

Consideremos agora uma transição de estados espaciais no tempo, de um instante incial $t_0=0$ até um instante final $t_F=T$. Se discretizarmos o tempo total T como $\delta t=\frac{T}{N}$, podemos expressar tal transição, valendo-se de N operadores de evolução temporal infinitesimal, na forma:

$$\langle q_F | e^{\frac{-i\hat{H}T}{\hbar}} | q_I \rangle = \langle q_F | e^{\frac{-i\hat{H}\delta t}{\hbar}} e^{\frac{-i\hat{H}\delta t}{\hbar}} \dots e^{\frac{-i\hat{H}\delta t}{\hbar}} | q_I \rangle$$
 (2.6.3.2).

Dada a completude dos autoestados de posição na Mecânica Quântica, que se expressa por $\int\!dq|q\rangle\!\langle q|=\hat{1}$, podemos inserir cada um desses conjuntos completos de

¹² A dedução original de Feynman pode ser apreciada em seu artigo clássico, (FEYNMAN, 1948). Para nossos propósitos, deduziremos a integral de trajetória de forma mais direta, valendo-nos do formalismo quântico disponível, que já fora introduzido ao longo deste Capítulo.

estados após cada um dos operadores de evolução temporal infinitesimal na expressão (2.6.3.2), de modo que ficamos com

$$\langle q_{F} | e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\mathcal{X}}}{\hbar}} | q_{I} \rangle = \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_{j} \right) \langle q_{F} | e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\mathcal{X}}}{\hbar}} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\mathcal{X}}}{\hbar}} | q_{N-2} \rangle \cdots \langle q_{2} | e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\mathcal{X}}}{\hbar}} | q_{1} \rangle \langle q_{11} | e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\mathcal{X}}}{\hbar}} | q_{I} \rangle$$

$$(2.6.3.3).$$

O uso da notação de produtório na expressão (2.6.3.3), acima, é para fins de obtenção de uma notação mais compacta e econômica. Deve-se entender que se trata de N-1 integrais iteradas:

$$\left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j\right) \equiv \int dq_{N-1} \int dq_{N-2} \cdots \int dq_2 \int dq_1$$

Concentremo-nos agora em uma amplitude individual de probabilidade de transição infinitesimal no tempo:

$$\langle q_{j+1}|e^{\frac{-i\hat{H}\hat{A}\hat{A}}{\hbar}}|q_{j}\rangle$$
 (2.6.3.4);

e, consideremos um operador Hamiltoniano da forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$$
 (2.6.3.5).

Os autoestados de momento também forma um conjunto completo de estados, da mesma forma que os autoestados de posição:

$$\int dp |p\rangle\langle p| = \hat{1} \qquad (2.6.3.6);$$

e o operador momento, quando aplicado em um de seus autoestados, obedece, naturalmente, a relação de autoestado/autovalor: $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$. Valendo-nos novamente da completude dos autoestados, e inserindo um conjunto completo de estados autoestados do momento (2.6.3.6) na expressão (2.6.3.4), e tomando o operador hamiltoniano (2.6.3.5), obtemos para a transição de estados individual:

$$\left\langle q_{j+1} \left| \exp \left(\frac{-i \delta t}{\hbar} \left(\frac{\hat{p}^{2}}{2m} + V(\hat{q}) \right) \right) \right| q_{j} \right\rangle = \int dp \left\langle q_{j+1} \left| \exp \left(\frac{-i \delta t}{\hbar} \left(\frac{\hat{p}^{2}}{2m} + V(\hat{q}) \right) \right) \right| p \right\rangle \left\langle p \left| q_{j} \right\rangle$$
 (2.6.3.7).

Sabemos que o produto escalar $\langle q | p \rangle$ é dado pela relação:

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipq}{\hbar}\right)$$
 (2.6.3.8);

cuja interpretação física é como se segue. O autoestado do momento é uma onda plana na representação das coordenadas. E é também, dentro do formalismo quântico devido a Dirac, uma amplitude de probabilidade, correspondendo à situação física de se estar em uma dada posição *q*' com um certo momento *p*'.

Voltando à expressão (2.6.3.7), e, notando-se que o Hamiltoniano, dado como uma função dos operadores momento e posição, opera sobre os autoestados de momento e posição, obtemos como resultado:

$$\left\langle q_{_{j+1}}\left|e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\delta}}{\hbar}}\right|q_{_{j}}\right\rangle = \int dp \exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{_{j}}\right)\right) \exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}\left(\frac{p^{_{2}}}{2m}\right)\right) \left\langle q_{_{j+1}}\left|p\right\rangle \left\langle p\left|q_{_{j}}\right\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{\delta t}{\hbar}\right) \left\langle q_{_{j}}\left|p\right\rangle + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{\delta t}{\hbar}\right) \left\langle q_{_{j}}\left|p\right\rangle + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{\delta t}{\hbar}\right) \left\langle q_{_{j}}\left|p\right\rangle + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{\delta t}{\hbar}\right|p\right\rangle + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{\delta t}{\hbar}\right) \left\langle q_{_{j}}\left|p\right\rangle + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{\delta t}{\hbar$$

$$\int dp \exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V(q_j)\right) \exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}\right)\right) \exp\left(\frac{ipq_{j+1}}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-ipq_j}{\hbar}\right) \frac{1}{2\pi\hbar} =$$

$$\left\langle q_{j+1}\left|e^{\frac{-i\hat{H}\hat{\delta}t}{\hbar}}\right|q_{j}\right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}\left(\frac{p^{2}}{2m}\right)\right)\exp\left(\frac{ipq_{j+1}}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-ipq_{j}}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{j}\right)\right) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{j}\right)\right)\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{j}\right)\right)$$

$$\left\langle q_{j+1}\left|e^{\frac{-i\hat{H}\delta t}{\hbar}}\right|q_{j}\right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}\left(\frac{p^{2}}{2m}\right)\right)\exp\left(\frac{ip\left(q_{j+1}-q_{j}\right)}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{j}\right)\right) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{j}\right)\right)\exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar}V\left(q_{j}\right)\right)$$

$$\left\langle q_{j+1} \left| e^{\frac{-i\hat{H}\delta \hat{x}}{\hbar}} \right| q_{j} \right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{-i\delta t}{\hbar} V(q_{j})\right) \int dp \exp\left(\frac{i\delta t}{\hbar} \left(-\frac{p^{2}}{2m} + \frac{p(q_{j+1} - q_{j})}{\delta t}\right)\right)$$
(2.6.3.9);

sendo que, na segunda passagem, utilizamos a propriedade (2.6.3.8).

A integral presente em (2.6.3.9) é uma integral gaussiana, que, uma vez calculada, resulta na seguinte expressão para a transição infinitesimal de estados (ZEE, 2003), (SREDNICKI, 2007):

$$\left\langle q_{j+1} \left| e^{\frac{-i\hat{H}\delta t}{\hbar}} \right| q_{j} \right\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \delta t}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_{j}}{\delta t} \right)^{2} + V(q_{j}) \right) \delta t \right)$$
 (2.6.3.10).

Finalmente, inserindo cada uma das *N* amplitudes de transição infinitesimal (2.6.3.10) na expressão (2.6.3.3), obtemos:

$$\left\langle q_{F} \left| e^{\frac{-i\hat{H}T}{\hbar}} \left| q_{I} \right\rangle = \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \delta t}} \right)^{N} \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_{j} \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_{j}}{\delta t} \right)^{2} - V(q_{j}) \right) \delta t \right)$$
(2.6.3.11).

Tomando-se agora o limite $\delta t \rightarrow 0$ (equivalentemente $N \rightarrow \infty$), vemos que:

$$\lim_{\dot{\alpha} \to 0} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\delta t} \right)^2 = \dot{q}^2 \qquad (2.6.3.12);$$

$$\lim_{\tilde{\alpha}\to 0} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_{j}}{\delta t} \right)^{2} - V(q_{j}) \right) \delta t \to \int_{0}^{T} \frac{m}{2} \dot{q}^{2} - V(q_{j}) dt \qquad (2.6.3.13);$$

o que dá ensejo à definição do operador de integração multidimensional (na verdade, de dimensão infinita) sobre todas as trajetórias como sendo:

$$\int Dq(t) \equiv \lim_{N \to \infty} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \right)^{N} \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int dq_{j} \right)$$
 (2.6.3.14).

Ao se inspecionar a expressão (2.6.3.13), reconhecemos imediatamente, a partir da Mecânica Analítica, o integrando como sendo a função Lagrangiana clássica e a integral temporal como a Ação, de modo que podemos, então, definir a amplitude de transição entre os estados, inicial e final, dada pela soma das amplitudes sobre todas as trajetórias q(t) possíveis, como a Integral de Trajetórias de Feynman:

$$\langle q_F, t_F | q_I, t_I \rangle = \int Dq(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt L(q, \dot{q}, t)\right)$$
 (2.6.3.15);

$$\langle q_F, t_F | q_I, t_I \rangle = \int Dq(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(q, \dot{q}, t)\right)$$
 (2.6.3.16).

Pode-se mostrar que a tal amplitude de transição de estados satisfaz, de fato, a equação de ondas de Schrödinger dependente do tempo (SAKURAI, 1994), de sorte que a formulação de Feynman é equivalente à da Mecânica Quântica padrão. Ademais, tal formulação dá uma dica clara acerca de como a Mecânica Clássica emerge da Mecânica Quântica no limite clássico, $\hbar \rightarrow 0^{13}$.

¹³ Analogamente, a partir da equação de ondas de Schrödinger dependente do tempo, no limite clássico $h/2\pi \rightarrow 0$, e considerando-se a ação S como a fase da função de onda, recuperamos a equação de Hamilton-Jacobi da Mecânica Clássica (JOSÉ; SALETAN, 1998), (LEMOS, 2007).

3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DE CONTROLE QUÂNTICO

Neste Capítulo, nosso intuito é tecer uma discussão breve acerca de alguns aspectos gerais em Controle Quântico, a partir de um ponto de vista experimental e femenológico. Algumas generalidades teóricas sobre a formulação do problema de Controle em Sistemas Quânticos já foram discutidas na Introdução da presente Tese.

Em diversos arranjos experimentais, concebidos para a execução de uma meta de controle, em um dado sistema quântico de interesse, campos eletromagnéticos ou pulsos de radiação coerente (lasers) interagem com o sistema, o qual pode constituir-se de moléculas, átomos, íons, núcleos, elétrons, etc, cuja dinâmica é apropriadamente descrita pela Mecânica Quântica, através da equação de Schrödinger, que modela adequadamente o sistema quântico a ser controlado.

Os operadores Hamiltonianos descritivos do Sistema de Controle Quântico são, em geral, previamente conhecidos de forma teórica, podendo ser matematicamente mais complexos, deste ponto de vista, ou, ainda, podem incluir aproximações, uma vez julgadas convenientes, para fins de simplicidade no tratamento matemático. Os Hamiltonianos de controle são também passíveis de serem simplificados mediante à existência de simetrias no sistema quântico de interesse.

Um Sistema de Controle Quântico (bilinear) pode ser definido como sendo aquele que pode ser descrito por um operador Hamiltoniano da forma que se segue (D'ALESSANDRO, 2007):

$$\hat{H}(u(t)) = \hat{H}_0 + \sum_k \hat{H}_k u_k(t)$$
 (3.1);

no qual, \hat{H}_0 corresponde ao Hamiltoniano do sistema livre, isto é, não controlado; e o somatório $\sum_k \hat{H}_k u_k(t)$ corresponde aos controles aplicados ao sistema, definindo o

Hamiltoniano do sistema controlado, $\hat{H}(u(t))$. Tanto \hat{H}_0 , como os \hat{H}_k , são operadores lieneares, hermiteanos e pertencentes ao Espaço de Hilbert H do sistema quântico considerado. Os esforços de controle $u_k(t)$ são funções reais, contínuas por partes, em geral.

Os campos eletromagnéticos, utilizados como esforços de controle u(t), podem, em grande parte dos casos de interesse prático, ser tratados como um campo clássico, de modo que não é necessário lançar mão de um tratamento de quantização do campo, como o que se encontra em capítulos de muitos textos de Mecânica Quântica, versando sobre a interação da radiação com objetos quânticos (SAKURAI, 1967), (PIZA, 2003) e (GOTTFRIED; YAN, 2004). Nesses casos, o campo é quantizado, de sorte que se manifestam os *quanta* do campo eletromagnético - os fótons, mas os objetos quânticos interagindo com eles, tais como elétrons, por exemplo, são ainda tratados pelo formalismo de Schrödinger 14 .

Encarar o campo eletromagnético de controle como um campo clássico simplifica bastante o tratamento matemático dos sistemas quânticos de controle, e, neste caso, dizemos tratar-se de uma aproximação "semi-clássica". Ademais, fornece predições que concordam com as observações macroscópicas, tendo em vista que os próprios aparatos de medida e detecção são objetos macroscópicos.

Tal tratamento simplifica as coisas, mas também pode ocasionar problemas, caso o arranjo experimental e os tempos de ação de controle sejam tais que haja a manifestação indesejável do fenômeno de *Decoerência Quântica* (SCHLOSSHAUER, 2008).

-

¹⁴ Uma quantização completa, a qual inclua também as partículas quânticas no arcabouço formal, conduz às Teorias Quânticas de Campo, em especial, a Eletrodinâmica Quântica, que trata os fótons, elétrons e pósitrons em pé de igualdade, do ponto de vista da formulação teórica (SAKURAI, 1967), (GREINER; REINHART, 1996), (RYDER, 1996), (SREDNICKI, 2007).

Destarte, é necessário ser cauteloso com relação à influência do meio externo, macroscópico, que pode acarretar perda da informação quântica e a destruição de propriedades quânticas desejáveis, como, o *Emaranhamento Quântico*, por exemplo, (BOUWMEESTER; EKERT; ZEILINGER, 2000), (NIELSEN; CHAUNG, 2000), (JAEGER, 2009), de grande importância para aplicações em Informação, Criptografia e Computação Quânticas.

Com o avanço tecnológico das últimas décadas, é possível, atualmente, ajustar ou moldar o campo eletromagnético (ou os pulsos de radiação coerente) de controle praticamente da forma que se desejar, a fim de obter a consecução de uma dada meta de controle, que, em termos de Controle Quântico, trata-se de efetuar transferências de estado desejadas no sistema de interesse.

Um arranjo experimental de um Sistema Quântico de Controle, em Malha Aberta, dotado de grande generalidade, e condizente com as considerações que fizemos, pode ser apreciado na Figura que se segue.

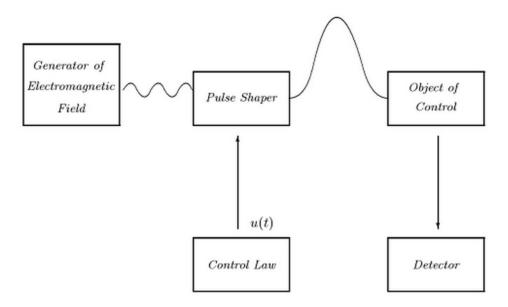


Figura 3.1: Arranjo experimental genérico para o Controle de um Sistema Quântico

Com efeito, se dispusermos de um modulador de pulsos que dê a forma desejada ao campo eletromagnético gerado, de acordo com a lei de controle u(t) projetada, podemos atuar no objeto quântico de interesse, de modo a obter as transições de estados quânticos desejadas ou alguma outra meta dinâmica proposta.

No próximo Capítulo, discutiremos a questão da *Controlabilidade* em Sistemas Quânticos.

4. CONTROLABILIDADE QUÂNTICA

4.1 INTRODUÇÃO

Dado um Sistema de Controle Quântico, adequadamente modelado através do formalismo da Mecânica Quântica, o qual pode (ou não) corresponder a certo um arranjo experimental de interesse, uma questão natural que emerge neste contexto diz respeito ao tipo de experimentos factíveis que podem ser executados. Esta questão pode ser formulada em termos do tipo de transferências de estado quânticos admissíveis no dado sistema. Em termos da Teoria de Sistemas Dinâmicos, trata-se do conceito teórico de Controlabilidade.

Consideremos, inicialmente, a dinâmica de um sistema quântico dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$
 (4.1.1).

Escrevamos (4.1.1), no entanto, na seguinte forma geral, mais próxima da linguagem de Sistemas Dinâmicos:

$$\dot{X}(t) = -iH(u(t))X(t)$$
 (4.1.2),

com $X(0) = I_{n \times n}$; fazendo-se a constante $\hbar = 1$. Isto é feito sem perda de generalidade ao se mudar as unidades envolvidas em questão, ou, alternativamente, ao se incorporar a supracitada constante no Hamiltoniano H do sistema quântico considerado.

Deve-se estudar o conjunto de matrizes unitárias, o que pode ser obtido mudando-se os controles para este sistema. Em outras palavras, estuda-se o conjunto dos *Estados Alcançáveis* do sistema.

Este conjunto é sempre um subconjunto do Grupo das Matrizes Unitárias de dimensão n, designado por U(n) ¹⁵.

Dado que -iH(u(t)) é anti-simétrico e hermiteano para todo $u(t) \in U$, considerando-se, aqui, U como o conjunto ou espaço de funções que contém todos os controles admissíveis u(t), então, os estados X devem ser unitários.

Se o conjunto das matrizes possíveis, que podem ser obtidas para o sistema (4.1.2), é o conjunto de todas as matrizes unitárias, então, o sistema é dito ser controlável.

Neste ponto, devemos definir, primeiramente, os Conjuntos Alcançáveis.

Considere o sistema (4.1.2), no qual, o controle u(t) assume-se pertencer ao espaço de funções U, tal como fora descrito. Denotando por X(u(t),t) a solução de (4.1.2), com controle u(t), no tempo t, o Conjunto Alcançável no tempo T>0 para (4.1.2), a ser denotado por R(T), é o conjunto de todas as matrizes unitárias \overline{X} tais que existe um controle $u \in \overline{U}$, com $X(T,u) = \overline{x}$.

O Conjunto Alcançável $R(\leq T)$ é definido como $R(\leq T)$: $R(\leq T) \equiv U_{0 \leq t \leq T} R(t)$. Alternativamente, temos:

$$R = U_{T \ge 0} R(T)$$
 (4.1.3).

Neste capítulo, descreveremos o Conjunto Alcançável para o sistema (4.1.2), no caso em que \overline{U} é o conjunto de funções u, constantes por partes, com valores em um conjunto U.

As matrizes unitárias U gozam da propriedade: $U^\dagger U = I$. O Operador Quântico de Evolução Temporal, por exemplo, deve ser unitário a fim de preservar a normalização dos estados quânticos evoluídos no tempo, e, por conseguinte, as probabilidades.

Note que, se X(u(t),t) é solução do sistema (4.1.2), com condição inicial igual à matriz identidade $n \times n$, então, a solução com condição inicial igual a S é dada por X(u(t),t)S. Portanto, se podemos controlar o sistema para do estado X_1 , com controle u_1 , para um estado X_2 , com controle u_2 , podemos também controlá-lo para o estado X_2X_1 , utilizando um controle que seja a concatenação de u_1 e u_2 . Em outras palavras, R é um semigrupo (D'ALESSANDRO, 2007).

Resulta que, do ponto de vista matemático, *R* é um *Grupo de Lie*, a saber, um *grupo*, o qual, além de sua caracterização algébrica usual, conta ainda com uma estrutura de *variedade diferenciável* (GILMORE, 74), (HASSANI, 1999), (KNAPP, 2002), (LEE, 2009). Ademais, somos capazes de caracterizar este Grupo de Lie de forma exata (D'ALESSANDRO, 2007).

Na seção a seguir, colecionam-se definições e fatos básicos acerca da Teoria de Grupos e Álgebras de Lie, relevantes aos nossos propósitos.

4.2 GRUPOS E ÁLGEBRAS DE LIE

Seguem definições básicas de Grupos e Álgebras de Lie, as quais são imprescindíveis à teoria de Controlabilidade Quântica.

Primeiramente, faz-se necessária uma introdução ao importante conceito de *Grupo*, que se trata de uma estrutura básica e fundamental não apenas em Álgebra, mas também em diversos ramos da Matemática Pura e Aplicada.

Definição 4.2.1: Um *Grupo G* é uma estrutura algébrica que consiste de um conjunto de elementos $g_1, g_2, ..., g_n \in G$, que é munido da operação, chamada de *Multiplicação de Grupo*, a ser denotada por " \circ ", tal que são válidos os seguintes postulados ou propriedades (GILMORE, 1974), (HUNGERFORD, 1980), (HASSANI, 1999):

i)
$$g_i \in G$$
, $g_j \in G \implies g_i \circ g_j \in G$ (fecho);

ii)
$$g_i \circ (g_i \circ g_k) = (g_i \circ g_i) \circ g_k$$
 (associatividade);

iii)
$$g_I \circ g_i = g_I \circ g_i = g_i$$
, $\forall g_i$ (existência da identidade);

iv)
$$g_i \circ g_i^{-1} = g_i^{-1} \circ g_i = g_I$$
, $\forall g_i$ (inversa única);

em particular, se um grupo obedece, ainda, a um quinto postulado, a saber:

$$V) g_i \circ g_j = g_j \circ g_i, \forall g_i, g_j \in G;$$

o grupo é dito ser comutativo ou abeliano.

Outra estrutura algébrica importante é dada pela seguinte:

Definição 4.2.2: Um *Campo F* é uma estrutura algébrica que consiste de um conjunto de elementos f_0 , f_1 , f_2 ..., f_n , dotados de duas operações, a saber, "+", chamada de *Adição*; e " \circ ", chamada de *Multiplicação Escalar*, tal que valem os postulados que se seguem (GILMORE, 1974), (HUNGERFORD, 1980):

- i) f₀ (identidade para a operação "+")
- ii) $f_i \circ f_i \in F$ (fecho);

iii)
$$f_i \circ (f_i \circ f_k) = (f_i \circ f_i) \circ f_k$$
 (associatividade);

iv)
$$f_i \circ 1 = 1 \circ f_i = f_i$$
 (identidade);

v)
$$f_i \circ f^1 = 1 = f^1 \circ f_i$$
, com $f_i \neq f_0$ (inversa - exceto para f_0);

vi)
$$f_i \circ (f_j + f_k) = f_i \circ f_j + f_i \circ f_k$$

 $(f_i + f_i) \circ f_k = f_i \circ f_k + f_i \circ f_k$ (lei distributiva);

vii)
$$f_i \circ f_i = f_i \circ f_i$$
 (comutatividade).

Apenas três campos são, geralmente, usados em Física. A saber, os números reais, os números complexos e os *quaternions* (GILMORE, 74). Temos também o seguinte:

Postulado: Um campo obedece a todas as propriedades dos grupos, e, além disso, é comutativo; em outras palavras, um campo é *grupo abeliano*.

Nos casos de interesse, aqui, o campo F é o conjunto dos números reais, \Re , ou o conjunto dos números complexos, C.

Introduziremos, agora, o conceito de *Grupo de Lie*, que é um grupo contínuo com estrutura de variedade diferenciável, inicialmente, de um ponto de vista geométrico. Assim, temos a seguinte (LEE, 2009):

Definição 4.2.3: Uma *variedade diferencial suave G* é chamada um *Grupo de Lie*, se é um grupo, tal que, o mapa definido pela operação de multiplicação de grupo μ : $G \times G \rightarrow G$, bem como o mapa inverso μ^{-1} : $G \times G \rightarrow G$, os quais são dados, respectivamente, por $\mu(g_i,g_i)=g_i\circ g_i$ e $\mu^{-1}(g_i)=g_i^{-1}$, são mapas de classe C^{∞} .

Uma $Variedade \ Diferenciável$ é um espaço topológico, no qual há um sistema de coordenadas definido, e que estende as noções de curvas e superfícies para dimensões arbitrárias. Propriedades básicas de diferenciabilidade são garantidas pelo sistema de coordenadas definido, de modo que, localmente, uma variedade se assemelha ao espaço euclideano R^n , ainda que não globalmente, possibilitando que se efetuem as operações usuais de Cálculo Multivariável. Definamos, a seguir, o conceito de variedade diferenciável de forma matematicamente precisa (NAKAHARA, 2003), (LEE, 2009).

Definição 4.2.4: Uma *variedade diferencial M*, *m*-dimensional, é caracterizada pelas seguintes propriedades:

- i) M é um espaço topológico;
- ii) M é coberta por uma família de conjuntos abertos { U_i }, isto é, $\bigcup_{i=1}^{i} U_i = M$;
- iii) φ_i é um homeomorfismo ¹⁶ de U_i em um subconjunto aberto de V_i , $V_i \subset \Re^m$, de modo que temos uma família de pares { (U_i, φ_i) };
- iv) Dados os conjuntos abertos U_i e U_j , tais que $U_i \cap U_j \neq \phi$, o mapa $\psi_{ij} = \varphi_i \circ \varphi_j^{-1}$, de $\varphi_i (U_i \cap U_j)$ para $\varphi_i (U_i \cap U_j)$, é infinitamente diferenciável, isto é, de classe C^{∞} .

Um par (U_i, φ_i) é chamado de *Carta* ("*chart*"), e o conjunto de todos eles, ou seja, a família inteira de pares $\{(U_i, \varphi_i)\}$ é chamado de *Atlas*. Um homeomorfismo φ_i mapeia um conjunto aberto U_i de M em um subconjunto aberto V_i contido em R^m , de modo a prover coordenadas a um ponto $p \in U_i$. Se $U_i \cap U_j \neq \phi$, a transição de um sistema de coordenadas para o outro é suave. Ademais, φ_i é representado por funções da forma

_

Um homeomorfismo é uma aplicação bijetiva, contínua, diferenciável, com inversa contínua de classe C⁰ (RUDIN,1976), (MUNKRES, 2000), (PUGH, 2003).

 $\{x^1(p),...,x^m(p)\}$, as quais devem ser contínuas e diferenciáveis. O conjunto $\{x^{\mu}(p)\}$ é chamado de sistema de coordenadas, ou, simplesmente, de coordenadas.

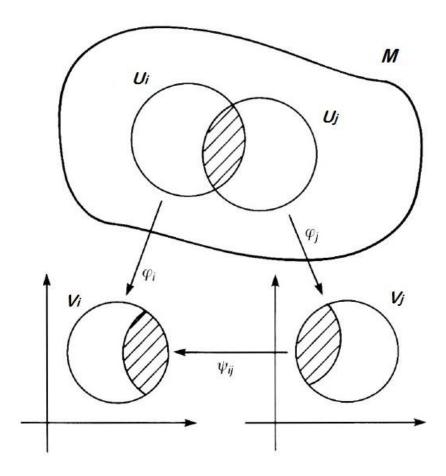


Figura 4.2.1 - O homeomorfismo φ_i mapeia um conjunto aberto U_i da variedade M em um subconjunto aberto V_i contido em R^m .

Usualmente, embora não obrigatoriamente, está implícita a hipótese de que a variedade diferenciável *M* é um *espaço topológico de Hausdorff* ¹⁷. Definamos, então, um espaço topológico, e que condições o tornam um espaço de Hausdorff. Temos, então, a seguinte (MUNKRES, 2000), (NAKAHARA, 2003):

¹⁷ Para a Física, praticamente a totalidade dos espaços topológicos de interesse são espaços de Hausdorff (NAKAHARA, 2003).

Definição 4.2.4: Um *espaço topológico* é um par ordenado (X, τ) , em que X é um conjunto qualquer, e, τ é uma topologia definida em X, que é uma coleção de subconjuntos abertos abertos de X, { U_i , com i = 1, 2, ...}, de modo que valem as seguintes propriedades:

- i) O conjunto vazio e X estão em τ : $\phi, X \in \tau$;
- ii) A união dos elementos de qualquer subcoleção (podendo ser infinita) de τ está em $\tau:\bigcup_i U_j \in \tau$;
- iii) A intersecção dos elementos de qualquer subcoleção finita de τ está em τ : $\bigcap_i U_j \in \tau \,.$

Usando essa terminologia, podemos dizer que um espaço topológico é um conjunto X com uma coleção de subconjuntos de X, definidos como abertos, tal que ϕ e X são ambos abertos, bem como uniões arbitrárias e intersecções finitas de conjuntos abertos são também abertos (MUNKRES, 2000).

Por fim, se um espaço topológico (X, τ) obedece a um quarto postulado adicional, a saber:

iv) Dados dois pontos arbitrários p e q, $p,q \in X$, então sempre existem dois conjuntos abertos, definindo vizinhanças de p e de q, U_p e U_q , respectivamente, tais que $U_p \cap U_q = \phi$;

então, tal espaço topológico é um *Espaço de Hausdorff* (MUNKRES, 2000), (NAKAHARA, 2003).

Após essa breve incursão em fundamentos de Geometria Diferencial e de Topologia, voltemos, agora, à Teoria de Grupos e Álgebras de Lie.

Definição 4.2.5: Uma Álgebra de Lie L sobre um campo F é um espaço vetorial sobre F com uma operação binária adicional $L \times L \to L$. Essa operação associa a um par ordenado de elementos $\{x,y\}$, em L, um elemento [x,y]. Este objeto é chamado de Colchete de Lie ou, simplesmente, de Comutador, e requer-se que o mesmo satisfaça os seguintes axiomas:

i) Bilinearidade:

$$[x+y,z] = [x,z] + [y,z];$$

 $[x+y,z] = [x,y] + [x,z].$

ii) Multiplicação por escalar:

$$[\alpha x, y] = \alpha [x, y], \ \forall \alpha \in F.$$

 $[x, x] = 0, \ \forall x \in L$

iii) A Identidade de Jacobi:

$$[x,[y,z]] + [y,[z,x]] + [z,[x,y]] = 0;$$

nos quais, x, y e z são Grupos de Lie quaisquer pertencentes à Álgebra de Lie L (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999), (KNAPP, 2002).

A estrutura de uma Álgebra de Lie é determinada de modo inequívoco pelas relações de comutação em uma base, desde que essas determinem o valor do comutador de qualquer par de elementos na Álgebra de Lie.

Talvez, o exemplo mais simples e não trivial de uma Álgebra de Lie seja os conjuntos dos vetores pertencentes a \Re^3 , com o produto vetorial fazendo o papel do comutador. Se escolhermos uma base $\{\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$, então, as relações de comutação são dadas por: $\vec{i} \times \vec{j} = \vec{k}$, $\vec{j} \times \vec{k} = \vec{i}$, $\vec{k} \times \vec{i} = \vec{j}$.

Interessar-nos-emos, para nossos fins, em Álgebras de Lie de matrizes, as quais são chamadas de Álgebras de Lie Lineares, nas quais o comutador [A,B] é o comutador de matrizes padrão: $[A,B] \equiv AB - BA$.

A Álgebra de Lie de todas as matrizes $n \times n$, com elementos reais ou complexos, é denotada por $gl(n,\mathfrak{R})$ ou $gl(n,\mathbb{C})$, respectivamente, e é chamada de Álgebra de Lie Geral sobre os números reais (ou complexos).

Definição 4.2.6: Sub-álgebras de Lie. Dada uma álgebra de Lie L, considere um subespaço $A \subseteq L$. Se A tem o comutador definido em L é uma álgebra de Lie, então, A é chamada de uma Sub-álgebra de L.

Sub-álgebras de $gl(n,\Re)$ ou gl(n,C) são Álgebras de Lie Lineares, que são também espaços vetoriais sobre o campo dos reais ou dos complexos, respectivamente. Um exemplo de um sub-álgebra de $gl(n,\Re)$ é a Álgebra Linear Especial $sl(n,\Re)$, a qual é a álgebra de Lie das matrizes reais $n \times n$ com traço igual a zero. Outro exemplo é a Álgebra de Lie Ortogonal $so(n,\Re)$, que é a álgebra de Lie das matrizes anti-simétricas, ortogonais com determinante igual a 1^{-18} .

-

As matrizes ortogonais O(n) formam um grupo e gozam da propriedade: $OO^T = I$, em que I é a matriz identidade. Em particular, o subgrupo SO(3), das matrizes ortogonais, 3x3, sobre o campo dos reais, com determinante unitário (S denota "especial"), tem um importante papel na Geometria e na Mecânica Clássica, pois é o subgrupo das matrizes de rotação, as quais permitem efetuar uma mudança de coordenadas de um vetor qualquer de um sistema de coordenadas para outro, em R^3 (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2001), (LEMOS, 2007).

A seguir, interessar-nos-emos pelas álgebras de Lie u(n), que corresponde às matrizes $n\times n$, hermiteanas e anti-simétricas, consideradas como uma álgebra de Lie sobre o campo real. Por exemplo, todas as matrizes -iH(u(t)) em (4.1.2): $\dot{X}(t) = -iH(u(t))X(t)$, com $X(0) = I_{n\times n}$, estão em u(n). A sub-álgebra su(n) de u(n) irá desempenhar um papel muito relevante, como se verá mais adiante.

O exemplo mais simples, embora de grande importância, é a sub-álgebra su(2), correspondente ao grupo SU(2) das matrizes unitárias, 2×2 . O conjunto span de su(2) é dado pelas matrizes múltiplas das Matrizes de Pauli ¹⁹:

$$\overline{\sigma}_{x} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.1a);$$

$$\bar{\sigma}_{y} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
 (4.2.1b);

$$\overline{\sigma}_z \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \quad (4.2.1c);$$

as quais satisfazem as relações de comutação idênticas às relações de comutação das Matrizes de Pauli originais (SAKURAI, 1994), (PIZA, 2003), (WEINBERG, 2012):

$$[\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y] = \overline{\sigma}_z$$
 $[\overline{\sigma}_y, \overline{\sigma}_z] = \overline{\sigma}_x$ $[\overline{\sigma}_z, \overline{\sigma}_x] = \overline{\sigma}_y$ (4.2.2 a,b,c).

As matrizes acima, (4.2.1 a, b, c), descrevem completamente a álgebra de Lie su(2).

_

¹⁹ Vide Capítulos 2 e 5, Subseções 2.2.3 e 5.3.3, respectivamente.

A seguir, definiremos dois conceitos teóricos muito importantes em Álgebra, em nosso caso, no contexto de Álgebras de Lie, a saber, os conceitos de *Homomorfismo* e *Isomorfismo*. Destarte, temos as seguintes:

Definição 4.2.7: Dadas duas Álgebras de Lie, L_1 e L_2 , um *Homomorfismo* Φ , $\Phi: L_1 \to L_2$, é um mapa linear que preserva o colchete de Lie de L_1 , da seguinte forma: $\Phi([x,y]_1) = [\Phi(x),\Phi(y)]_2$, em que, $[.,.]_1$ e $[.,.]_2$ representam os colchetes de Lie de L_1 e L_2 , respectivamente.

Definição 4.2.8: Um *Homomorfismo bijetivo* é chamado de *Isomorfismo*; e duas Álgebras de Lie são ditas *isomórficas* se existe um Isomorfismo.

Em linhas gerais, o mapeamento de uma estrutura algébrica (*grupo*, *campo*, *anel*, etc) em outra estrutura algébrica similar é chamado de *homomorfismo* se preserva todas as operações de combinação associadas àquela estrutura. Se a aplicação é, adicionalmente, "um para um", ou seja, bijetiva, de sorte que uma inversa existe e está bem definida, então, trata-se de um *isomorfismo*. Se o mapemento ou aplicação se dá em uma estrutura algébrica, que pode ser escrita explicitamente, de forma analítica, é chamada de *Realização*. Se isto se dá em termos de um conjunto de matrizes, diz-se tratar de uma *Representação* (GILMORE, 1974), (HUNGERFORD, 1980), (HASSANI, 1999).

Assim, um homomorfismo (ou isomorfismo) de L_1 em uma sub-álgebra de gl(n,R) ou em gl(n,C) é uma Representação de L_1 . Ademais, pode-se verificar facilmente que, para um mapa linear ser um homomorfismo Φ , tal que $\Phi([x,y]_1) = [\Phi(x),\Phi(y)]_2$, este precisa valer apenas para os elementos da base de L_1 (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999).

Como um exemplo simples de duas álgebras de Lie isomórficas, consideremos L_1 e L_2 definidas como se segue. L_1 é a álgebra de Lie dos vetores de \mathbb{R}^3 com o produto

vetorial definido como o comutador (ou colchete de Lie). Seu conjunto span é dado pela terna de versores $\{\vec{i},\vec{j},\vec{k}\}$. Seja $L_2\equiv su(2)$, a qual tem como span $\overline{\sigma}_x\equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & i\\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\overline{\sigma}_y\equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ e $\overline{\sigma}_z\equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i & 0\\ 0 & -i \end{pmatrix}$. Devido às relações de comutação $[\overline{\sigma}_x,\overline{\sigma}_y]=\overline{\sigma}_z$, $[\overline{\sigma}_y,\overline{\sigma}_z]=\overline{\sigma}_x$ e $[\overline{\sigma}_z,\overline{\sigma}_x]=\overline{\sigma}_y$, de su(2), e, $\vec{i}\times\vec{j}=\vec{k}$, $\vec{j}\times\vec{k}=\vec{i}$, $\vec{k}\times\vec{i}=\vec{j}$, de L_1 , a correspondência a seguir é um *isomorfismo*:

$$\vec{i} \leftrightarrow \overline{\sigma}_x \qquad \vec{j} \leftrightarrow \overline{\sigma}_y \qquad \vec{k} \leftrightarrow \overline{\sigma}_z \qquad (4.2.3 \text{ a,b,c}).$$

Consideremos, agora, o conceito de Conjunto Gerador de uma Álgebra de Lie.

Definição 4.2.9: Dado um conjunto de vetores de uma álgebra de Lie L, $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$, o conjunto de todos os comutadores (com possíveis repetições) de $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$ é *span* da sub-álgebra de L, a qual é chamada de *Álgebra de Lie gerada por* $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$, a ser denotada por $\{x_1, x_2, ..., x_n\}_L$. a álgebra de Lie $\{x_1, x_2, ..., x_n\}_L$ é a menor sub-álgebra de L contendo o conjunto de vetores $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$.

Notemos que, em geral, para provar que $\{x_1, x_2,..., x_n\}_L$ é igual a uma dada subálgebra A, precisa-se apenas produzir uma base de A com o conjunto de comutadores de $\{x_1, x_2,..., x_n\}$, possivelmente repetidos. Por exemplo, considere L a álgebra de Lie de matrizes complexas, quadradas, $2x^2$, sobre o campo dos números complexos. A álgebra de Lie gerada por $\{\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y, \overline{\sigma}_z\}$ em L é igual a su(2). Devido às relações de comutação de $\{\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y, \overline{\sigma}_z\}$, a álgebra de Lie gerada por $\{\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y\}$, $\{\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y\}_L$ é igual a su(2) também (GILMORE, 1974).

Voltemos nossa atenção, agora, aos Grupos de Lie, já introduzidos do ponto de vista teórico e formal ao início desta Seção. Um exemplo importante de Grupo de Lie é o chamado *Grupo Linear Geral*, denotado por Gl(n,C), o qual é definido como o grupo

de matrizes não singulares, de dimensão n, sobre o campo dos complexos (matriz de elementos complexos). Este é um grupo sob a operação de multiplicação de matrizes, ademais, temos que det(AB) = det(A).det(B), e podemos dar a ele a estrutura de variedade diferenciável ao mapear as partes real e imaginária de cada elemento de matriz em conjuntos abertos definidos em R^{2n^2} . Por causa da multiplicação de matrizes e pelo fato da inversão apenas requerer operações analíticas, Gl(n,C) é um grupo de Lie (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999).

De modo análogo ao que foi estabelecido para as Álgebras de Lie, definiremos, a seguir os conceitos de Homomorfismo e Isomorfismo entre Grupos de Lie.

Definição 4.2.10: Dados dois Grupos de Lie, G_1 e G_2 , um mapa analítico (ou diferenciável) Φ , $\Phi:G_1\to G_2$, é um *Homomorfismo de Grupos de Lie*, se ele preserva as operações de G_1 , isto é, para cada $g_1,g_2\in G_1$, temos: $\Phi(g_1\circ g_2)=\Phi(g_1)\Phi(g_2)$, com $\Phi(g_1^{-1})=[\Phi(g_1)]^{-1}$. As operações à esquerda e à direita destas condições referem-se às operações em G_1 e G_2 , respectivamente.

Definição 4.2.11: Um Homomorfismo de Grupos de Lie, o qual é também bijetivo, é dito ser um *Isomorfismo de Grupos de Lie*. Destarte, dois grupos de Lie quaisquer, G_1 e G_2 , são *isomórficos* se existe um Isomorfismo entre eles.

Os grupos de Lie de maior interesse em Controle Quântico correspondem ao grupo de Lie das matrizes unitárias, de dimensão n, e ao grupo de Lie das matrizes unitárias, de dimensão n, com determinante igual a 1, a saber, o Grupo Unitário U(n) e o Grupo Unitário Especial SU(n), respectivamente (D'ALESSANDRO, 2007).

Estes são Subgrupos de Lie de Gl(n,C) no seguinte sentido:

Definição 4.2.12: Um *Subgrupo H* de um *Grupo de Lie G* é um grupo de Lie com a estrutura de operações algébricas herdada de *G*, bem como é, ademais, uma *Subvariedade Diferenciável de G*.

Tal fato matemático nos remete à próxima:

Definição 4.2.13: Uma Subvariedade Diferenciável de uma Variedade Diferenciável M, de dimensão m, é um subconjunto N de M, $N \subseteq M$, de dimensão n, com $n \le m$, dotado da mesma topologia τ de M, tal que:

- i) $\forall p \in N$, existe uma carta (U, φ) de M, tal que $\varphi(p) = 0$;
- ii) φ mapeia o aberto U em uma bola aberta de raio ε , com centro na origem de \mathbb{R}^m , ou seja, $\varphi: U \to \mathbb{R}^m$, tal que $\varphi(U) = B_{\varepsilon}^m$, sendo m a dimensão da variedade M;
- iii) $\varphi(U \cap N)$ é o conjunto de pontos em B_{ε}^m com as últimas m n coordenadas iguais a zero, ou seja, $\varphi(U \cap N) \subseteq B_{\varepsilon}^m = \{x^{\mu}(p_1 \dots p_n \ 0 \dots 0)_m\}$, sendo n a dimensão de N.

Essa definição foi adaptada de (BOOTHBY, 2002), no entanto, uma definição alternativa pode ser dada (LEE, 2009):

Definição 4.2.14: Um subconjunto S de uma Variedade Diferenciável Suave M, de dimensão n, é uma Subvariedade Regular de dimensão k, se $\forall p \in S$ está no domínio de uma carta (U,φ) , a qual tem a seguinte propriedade com respeito a S: $\varphi(U \cap S) = \varphi(U) \cap (R^k \times \{c\})$ para algum $c \in R^{n-k}$, em que c é um subespaço vetorial de R^n . Usualmente, c é escolhido como $\mathbf{0}$, o que sempre pode ser realizado por uma composição com uma translação em R^n . Ademais, se um subconjunto $S \subset M$ é coberto por um conjunto de cartas, do tipo acima mencionado, S é dito possuir a propriedade de Subvariedade Regular.

Conforme Lee (2009) destaca, a terminologia com respeito a variedades e subvariedades não é totalmente padronizada, de modo que, *mutatis mutandis*, podemos considerar as duas definições dadas acima como equivalentes.

Consideremos, agora, um Grupo de Lie G, geometricamente associado a uma variedade M; um subconjunto aberto U, $U \subset M$; e um intervalo I, definido na reta real, tal que $I \subset R : I \equiv [a,b]$. Graficamente, podemos apreciar tal construção na figura abaixo:

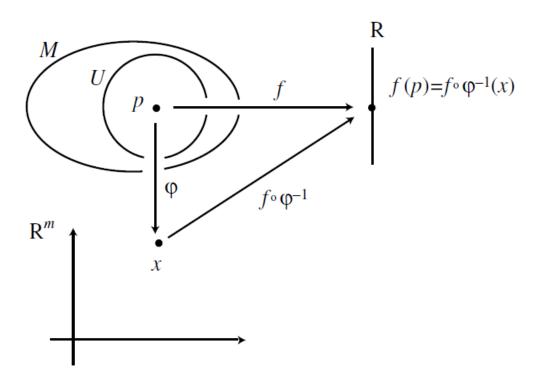


Figura 4.2.2: A função $f: M \to R$ e sua representação por coordenadas $f \circ \varphi^{-1}$

Para definir um vetor tangente, precisamos de uma curva $c: [a,b] \to M$, bem como de uma função $f: M \to R$, sendo I = [a,b] o intervalo aberto contendo t = 0, definido na reta real. Definimos o vetor tangente em c(0) como uma derivada direcional

de uma função f(c(t)) ao longo da curva c(t), em t=0. A taxa de crescimento de f(c(t)) com relação ao parâmetro t, calculada em t=0, é, pois:

$$\frac{df(c(t))}{dt}|_{t=0}$$
 (4.2.4).

Em termos de coordenadas locais, (4.2.4) se torna:

$$\frac{\partial f}{\partial x^{\mu}}\frac{dx^{\mu}(c(t))}{dt}\big|_{t=0} \quad (4.2.5);$$

sendo que a derivada parcial $\partial f/\partial x^{\mu}$, na verdade, traduz-se em $\partial \left(f\circ \varphi^{-1}\right)/\partial x^{\mu}$, levando-se em conta a representação das coordenadas do ponto x, em \mathbb{R}^m , em termos da composição $f\circ \varphi^{-1}$ (Figura 4.2.2). Podemos pensar na derivada (4.2.4), em t=0, $\frac{df(c(t))}{dt}|_{t=0}$, como sendo a aplicação de um operador diferencial X na função f, como se segue:

$$X \equiv X^{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \right) \quad (4.2.6);$$

com X^{μ} dado por:

$$X^{\mu} = \frac{dx^{\mu}(c(t))}{dt}|_{t=0} \quad (4.2.7);$$

de modo que:

$$\frac{df(c(t))}{dt}\Big|_{t=0} = X^{\mu} \left(\frac{\partial f}{\partial x^{\mu}}\right) \equiv X[f] \quad (4.2.8).$$

Em (4.2.8), a última igualdade define, pois, X [f]; sendo que é o objeto (4.2.6), $X = X^{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \right)$, que definiremos como o vetor tangente (derivada direcional) à variedade M, no ponto p = c(0), ao longo da direção dada pela curva c(t) (NAKAHARA, 2003).

Podemos vislumbrar melhor essas construções matemáticas ao apreciar a Figura que se segue:

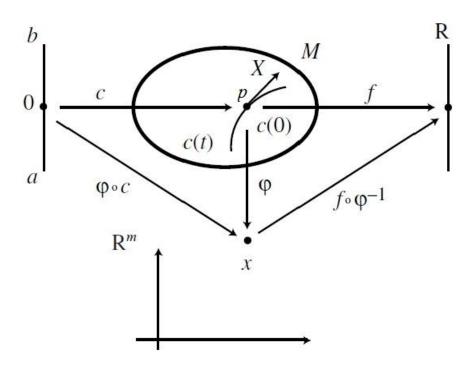


Figura 4.2.3: Uma curva c(t) em M e uma função f definem um vetor tangente X ao longo da curva.

No afã de obtermos mais generalidade e rigor, definiremos, ainda, o vetor tangente X em termos de uma classe de equivalência de curvas. Dadas duas curvas $c_1(t)$ e $c_2(t)$, na variedade M, e parametrizadas no intervalo I, elas são ditas equivalentes, $c_1(t) \sim c_2(t)$, se:

i)
$$c_1(0) = c_2(0) = p$$
, com $p \in I$;

ii)
$$\frac{dx^{\mu}(c_1(t))}{dt}|_{t=0} = \frac{dx^{\mu}(c_2(t))}{dt}|_{t=0};$$

em que $x^{\mu}(.)$ representa o sistema de coordenadas resultante do mapeamento de um ponto $p \in U$, com $p \in c(t)$ (uma dada curva parametrizada em M), em termos do homeomorfismo φ ; ou em termos da composição $f \circ \varphi^{-1}(x)$; conforme o ilustrado pelas Figuras 4.2.2 e 4.2.3.

Todas as classes de equivalência de curvas em $p \in M$, a saber, todos os vetores tangentes em p, formam um espaço vetorial chamado de Espaço Tangente de M em p, que é denotado por T_pM . Os vetores de de base de T_pM são expressos por $e_\mu = \partial/\partial x^\mu$, com $(1 \le \mu \le m)$; e temos que a dimensão do espaço tangente é igual à dimensão da variedade, ou seja, $\dim T_pM = \dim M$. A base $\{e_\mu\}$ é chamada de base de coordenadas, de modo que um vetor $V \in T_pM$ é escrito como $V = V^\mu e_\mu$, valendo-se da convenção de soma de Einstein para índices repetidos (contravariantes e covariantes). Os números V^μ são as componentes de V com respeito aos elementos da base e_μ (NAKAHARA, 2003).

Com relação ao espaço tangente de um grupo de Lie de matrizes, é possível fornecer a ele a estrutura de uma álgebra de Lie sobre o campo dos reais, conforme veremos a seguir.

Consideremos uma parametrização de um grupo de Lie G como um subgrupo de Gl(n,C) ou de Gl(n,R), que são os grupos lineares gerais das matrizes $n \times n$, sobre o campo dos números complexos ou reais, respectivamente, dispondo, portanto, de $2n^2$ ou de n^2 parâmetros, com possibilidade de redundância. Então, uma curva c(t), parametrizada no intervalo real I, c(t) estando contida em G, pode ser escrita, nessas

coordenadas, como um mapa $\eta: \mathbb{R} \to Gl(n,C)$, ou $\eta: \mathbb{R} \to Gl(n,R)$, com um mapa $\xi: t \to \widetilde{X}(t)$, em que o vetor tangente $\widetilde{X}(t)$ é, agora, parametrizado em função de um único parâmetro - t (D'ALESSANDRO, 2007).

À luz de (4.2.6), (4.2.7) e (4.2.8), e com o emprego dos subgrupos lineares gerais, conforme foi estabelecido, constatamos que a derivada no tempo, d/dt, de $\widetilde{X}(t)$, em t=0, é outra matriz, a qual denotaremos por \widetilde{A} . Ademais, isso também determina de forma unívoca as derivadas que são necessárias para o estabelecimento de classes de equivalência.

Destarte, a curva definida como $\{\exp(\widetilde{A}t):t\in R\}$ está na mesma classe de equivalência da curva $\{\widetilde{X}(t):t\in R\}$ (D'ALESSANDRO, 2007).

Temos, então, um *subgrupo uniparamétrico* de G; e pode ser provado que o mesmo pertence a grupo de Lie G, para todo $t \in R$ (GILMORE, 1974), (KNAPP, 2002).

Ademais, isto define uma correspondência "1 para 1", ou bijetiva, entre vetores tangentes e subgrupos paramétricos. Se considerarmos a álgebra de Lie gerada pelas matrizes \tilde{A} , obtidas conforme o procedimento descrito acima, a cada matriz \tilde{A} corresponde um subgrupo uniparamétrico, e, portanto, também a um vetor tangente (D'ALESSANDRO, 2007). Com efeito, pode-se provar que, se e^{At} e e^{Bt} estão em G, então, $e^{(A+B)t}$ e $e^{[A,B]t}$ também estão, o que decorre das propriedades do comutador (ou colchete de Lie), das propriedades de grupos, das propriedades de exponenciais de matriz e da Fórmula de Trotter (GILMORE, 1974), (KNAPP, 2002), (LEE, 2009).

Examinemos, agora, certas relações de correspondência entre Grupos e Álgebras de Lie. Dado um grupo de Lie de matrizes, com as mesmas obtidas com ao se diferenciar curvas parametrizadas em I, no tempo t=0, as matrizes geram a Álgebra de Lie correspondente.

Essa Ágebra de Lie é isomórfica, no sentido de espaços vetoriais, ao Espaço Tangente do Grupo de Lie, conforme fora definido. Ademais, conforme o que fora visto, tem a mesma dimensão do Espaço Tangente, que é a dimensão do Grupo de Lie encarado como uma Variedade Diferenciável.

De forma respectiva, dada uma álgebra de Lie de matrizes, *L*, os subgrupos unidimensionais associados geram um grupo de Lie da forma:

$$e^{L} \equiv \left\{ e^{A_{1}} e^{A_{2}} ... e^{A_{m}}; A_{1}, A_{2}, ..., A_{m} \in L \right\}$$
 (4.2.9);

o qual é o único subgrupo de Lie de Gl(n,R), ou de Gl(n,C), conectado com a álgebra de Lie L (D'ALESSANDRO, 2007).

O mapa da Álgebra de Lie L para o Grupo de Lie correspondente e^L , o qual associa $A \in L$ e $e^A \in e^L$, é chamado de *Mapa Exponencial*, o qual desempenha um papel muito importante na Teoria de Grupos e Álgebras de Lie (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999), (KNAPP, 2002); bem como será essencial na teoria de Controlabilidade Quântica, a seguir.

4.3 TESTE DE CONTROLABILIDADE

O principal teste de Controlabilidade de Sistemas Quânticos, escritos na forma $\dot{X}(t) = -iH(u(t))X(t)$, é dado pelo seguinte:

Teorema 4.3: O conjunto de estados alcançáveis R para o sistema $\dot{X}(t) = -iH(u(t))X(t)$ é o grupo de Lie associado à álgebra de Lie L gerada pelo $span_{u \in U}\{-iH(u)\}$. De forma equivalente, $R = e^L$. Tal álgebra de Lie L é chamada de Álgebra de Lie Dinâmica associada ao sistema.

Esta é sempre uma sub-álgebra de u(n): está associada ao grupo U(n), das matrizes unitárias, o qual rege as evoluções dinâmicas na Mecânica Quântica: lembremo-nos que a evolução temporal é dada por um operador unitário, de modo a conservar as probabilidades; em outras palavras, a normalização dos vetores de estado ao longo do tempo.

No caso em que $\dim(L)=n^2=\dim(u(n))$, o que é equivalente a L=u(n) e a $e^L=U(n)$, o sistema é dito ser controlável. Neste caso, R=U(n), o que significa que toda matriz unitária pode ser obtida ao se escolher um controle apropriado u em $\dot{X}(t)=-iH(u(t))X(t)$.

Diremos que o sistema é *controlável* mesmo no caso em que $\dim(L) = n^2 - 1 = \dim(su(n))$, o que é equivalente a L = su(n) e a $e^L = SU(n)$.

Às vezes, usa-se a terminologia "Controlabilidade de Operador" ou "Controlabilidade Completa" para distinguir este caso - controlabilidade do sistema $\dot{X}(t) = -iH(u(t))X(t) \quad \text{- do caso, no qual se tem Controlabilidade de Estado } \left|\psi\right>,$ conforme será visto mais adiante.

A condição do teorema anterior é frequentemente citada na literatura como "Condição de Posto da Álgebra de Lie" (Lie Algebra Rank Condition).

Uma prova do Teorema acima enunciado pode ser encontrada no Apêndice D de (D'ALESSANDRO, 2007).

Para gerar uma base da Álgebra Dinâmica L, podemos nos valer do seguinte procedimento (D'ALESSANDRO, 2007). Primeiramente, toma-se uma base no conjunto $span_{u\in U}\{-iH(u)\}$, digamos, $\{A_1,...,A_s\}$.

Um colchete de Lie repetido é um elemento de *L* da forma:

$$[X_1, [X_2, [...[X_{p-1}, X_p]]]]$$
 (4.3.1),

com $X_1,...,X_p \in \{A_1,...,A_s\}$. Define-se a "profundidade" de um colchete de Lie B, obtido de $\{A_1,...,A_s\}$, como o número de colchetes efetuados para obter B, isto é, p-1, na definição (4.3.1) acima.

O procedimento recursivo é como se segue.

- 0) Listar os vetores de "profundidade 0", $\{A_1,...,A_s\}$. Este é o passo preliminar. Os passos iterativos são os seguintes:
- 1) Calcule os colchetes de Lie dos elementos de "profundidade k-1", obtidos no passo k-1, com os elementos de profundidade 0. Desta forma, obtém-se elementos de profundidade k;
- 2) A partir dos elementos obtidos, selecione aqueles que formam um conjunto linearmente independente, juntamente com aqueles obtidos até o passo k-1;
- 3) Interrompa o procedimento caso não haja um novo vetor, ou se a dimensão do conjunto linearmente independente é n^2 1 ou n^2 .

O conjunto de matrizes, que é obtido desta maneira, forma uma base da Álgebra de Lie Dinâmica L. Ademais, o procedimento recursivo descrito sempre terminará, uma vez que L é uma sub-álgebra de u(n), tendo, portanto, no máximo dimensão n^2 .

Para ilustrarmos uma aplicação prática deste procedimento, analisemos o seguinte exemplo, adaptado a partir de (D'ALESSANDRO, 2007).

Em geral, em sistemas de controle quântico de uma rede de partículas dotadas de spin, consideram-se as interações entre as partículas e as interações das mesmas com um campo magnético externo, desprezendo-se demais graus de liberdade. Neste caso, o operador Hamiltoniano é uma composição da parte que modela as interações entre as partículas, e outra que modela a interação das mesmas com o campo externo. Esta última parte tem a forma:

$$\hat{H}_{I}(t) = \sum_{j=1}^{N} \gamma_{j} \hat{S}_{j} . \vec{B}(t)$$
 (4.3.2);

em que, \hat{S}_j é o Operador Momento Angular Spin da j-ésima partícula; γ_j é a razão giromagnética da mesma; e, N é um número total de partículas.

O espaço de Hilbert total para esses sistemas é dado pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert de cada subsistema individual, cada um deles tendo, possivelmente, diferentes dimensões, de acordo com os valores de seus spins. O operador de momento angular spin $\hat{S}_j \equiv \{\hat{S}_{xj}, \hat{S}_{yj}, \hat{S}_{zj}\}$, para a j-ésima partícula, agindo no espaço de Hilbert total, com j=1,2,...,N, é dado por :

$$\hat{S}_{x_j,y_j,z_j} = I \otimes I \otimes ... \otimes \hat{S}_{x,y,z} \otimes I \otimes ... \otimes I \qquad (4.3.3);$$

em que, $\hat{S}_{x,y,z}$ aparece na j-ésima posição. A parte do Hamiltoniano (livre) que modela as interações entre as partículas pode assumir diferentes formas, de acordo com o sistema em questão, com as aproximações envolvidas, com considerações acerca da modelagem que se pretende, etc.

Um dos modelos de interações em redes de spins mais comuns é a chamada Interação de Ising, dada pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{H}_0 = \sum_{k < j} J_{kj} \hat{S}_{zk} \hat{S}_{zj} \qquad (4.3.4);$$

em que, $\hat{S}_{z(k,j)}$ é a componente z do momento angular spin para a partícula (k, j); e J_{kj} são as constantes de acoplamento.

As dinâmicas de tais modelos de redes de spins são descritas pela equação de Schrödinger com o Hamiltoniano apropriado. Para escrever a equação de Schrödinger como uma equação diferencial de forma matricial, considera-se o espaço de Hilbert do sistema de n spins, o qual é o produto tensorial dos espaços de Hilbert dos spins individuais. Uma vez de posse do Hamiltoniano em forma matricial, pode-se escrever a equação diferencial para as componentes do estado quântico (bem como para a matriz de densidade ρ , no caso de um *ensemble*). Pode ser facilmente visto que, em tal equação diferencial, o controle u(t), dado pelo campo magnético externo $\vec{B}_e(t)$, multiplica o estado.

Seja, então, um sistema de duas partículas de spin $\frac{1}{2}$, caracterizado por uma interação de Ising, submetidas a um campo magnético externo, com magnitude igual a zero apenas na direção x, o qual faz o papel do controle u. Assumindo duas constantes giromagnéticas iguais para as duas partículas, o conjunto de matrizes, as quais são obtidas no $passo\ 0$ do procedimento de geração de uma base da Álgebra de Lie Dinâmica L, é dado pelo span de:

$$\{A_1, A_2\} = \{i\sigma_x \otimes \sigma_x, i\sigma_x \otimes I_{2\times 2} + iI_{2\times 2} \otimes \sigma_x\}$$
 (4.3.5);

no qual, σ_{x} , σ_{y} e σ_{z} são as matrizes de Pauli.

No passo 1, valendo-se da seguinte propriedade do produto tensorial entre matrizes, a saber, $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$, encontra-se a matriz A_3 , dada pelo colchete de Lie (ou comutador) de A_1 e A_2 , $A_3 = [A_1, A_2]$. Resulta disso, então:

$$A_3 = 2i\sigma_v \otimes \sigma_z + 2i\sigma_z \otimes \sigma_v \quad (4.3.6);$$

sendo que, em (4.3.6), foram também empregadas as propriedades de comutação das matrizes de Pauli.

No passo 2, já não se encontra mais nenhuma nova matriz, que seja linearmente independente. Logo, a Álgebra de Lie Dinâmica L deste sistema é o conjunto span de $\{A_1, A_2, A_3\}$, o qual é, pois, uma sub-álgebra própria de su(4), conforme se esperava, mas a qual possui, no entanto, dimensão igual a 3.

Destarte, conclui-se que o sistema não é controlável.

4.4 NOCÕES DE CONTROLABILIDADE PARA O ESTADO QUÂNTICO

Anteriormente, foi visto que um cálculo da Álgebra de Lie Dinâmica dá informação sobre o conjunto de todas as transformações possíveis entre os estados passíveis de serem alcançados com um aparato físico, ou seja, do ponto de vista matemático, valendo-se de todos os controles u que gerem uma álgebra de Lie dinâmica equivalente a u(n) ou a su(n), correspondentes aos grupos de Lie U(n) e SU(n), respectivamente.

Aqui, investiga-se em que casos esses conjuntos de transformações permitem uma transferência (qualquer) desejada entre dois estados quânticos. Assim, temos a seguinte:

Definição 4.4.1: A equação de Schrödinger da forma:

$$\frac{d}{dt}\vec{\psi}(t) = -iH(u(t))\vec{\psi}(t) \quad (4.4.1)$$

é dita ser "controlável para estado puro" ("pure state controlable") se, para cada par de estados inicial e final, $\vec{\psi}_0$ e $\vec{\psi}_1$, respectivamente, existem funções de controle u(t) e um tempo T>0, tal que a solução de (4.4.1) no tempo T, com condição inicial $\vec{\psi}_0$, é $\vec{\psi}(T)=\vec{\psi}_1$. O estados $\vec{\psi}_0$ e $\vec{\psi}_1$ são dois vetores na esfera complexa de raio unitário, S_C^{n-1} .

Uma vez que para qualquer vetor $\vec{\psi}_1$, $\vec{\psi}_1$ e $e^{i\phi}\vec{\psi}_1$, representam o mesmo estado físico, para qualquer $\phi \in \Re$, de um ponto de vista físico, a propriedade que se segue é equivalente à *Controlabilidade de Estado Puro* ("*Pure State Controlability*"). Destarte, temos a seguinte:

Definição 4.4.2: O sistema (4.4.1) é *Equivalente em Controlabilidade de Estado* ("*Equivalent State Controllable*") se, para todo par de estados inicial e final, $\vec{\psi}_0$ e $\vec{\psi}_1$, existem controles u e um fator de fase ϕ , tal que a solução $\vec{\psi}(t)$ de (4.4.1), com $\vec{\psi}(0) = \vec{\psi}_0$, satisfaz $\vec{\psi}(T) = e^{i\phi}\vec{\psi}_1$, para algum T > 0.

Para obtermos a Controlabilidade de Estado Puro, temos a seguinte condição matemática necessária e suficiente, a qual descreveremos abaixo.

A solução do sistema (4.4.1), $\frac{d}{dt}\vec{\psi}(t) = -iH(u(t))\vec{\psi}(t)$, com condição inicial $\vec{\psi}_0$, pode ser escrita na forma matricial como:

$$\vec{\psi}(t) = X(t)\vec{\psi}_0$$
 (4.4.2);

em que X(t) é a solução matricial da equação de Schrödinger de operador. X(t) assume valores no grupo de Lie e^L , em que L é a álgebra de Lie dinâmica associada ao sistema. Portanto, todos os estados que podem ser obtidos como uma solução de (4.4.1), com condição inicial igual a $\vec{\psi}_0$ são os estados pertencente ao conjunto:

$$O_{\psi_0} \equiv \{X\vec{\psi}_0 \mid x \in e^L\}$$
 (4.4.3).

O sistema é *Controlável para Estado Puro* se, para todo par de vetores complexos com norma igual a 1, ou seja, pertencentes a S_C^{n-1} , existe uma matriz X em e^L , tal que $\vec{\psi}_1 = X\vec{\psi}_0$.

Tendo em vista esta observação, a questão de Controlabilidade de Estado Puro, reduz-se a uma análise das propriedades de e^L , atuando como um *Grupo de Transformação de Lie* em S_c^{n-1} ; e, e^L será dito *transitivo* se a propriedade acima valer (D'ALESSANDRO, 2007).

Por fim, definiremos matematicamente os conceitos de *Ação*, de *Grupo de Transformação de Lie* e de *Transitividade*, evocados acima. Destarte, temos as seguintes definições (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999):

Definição 4.4.3: Dados um grupo de Lie G e uma variedade diferenciável M, uma Aç \tilde{a} o de G em M é definida como um mapa ou aplicação diferenciável θ : $G \times M \to M$, a qual satisfaz as seguintes condições:

i) $\theta(I,x)=x$, $\forall x \in M$, sendo I o elemento identidade do grupo;

ii)
$$\theta(g_2, \theta(g_1, x)) = \theta(g_2g_1, x)$$
.

É mais conveniente o uso da notação gx, em vez de $\theta(g,x)$, de modo que a propriedade ii), da definição acima, escreve-se, alternativamente, como:

ii')
$$g_2(g_1x) = (g_2g_1)x$$
.

Definição 4.4.4: Se uma *Ação* existe para um grupo de Lie *G*, então, *G* é chamado de *Grupo de Transformação de Lie sobre M*.

Definição 4.4.5: G é dito ser transitivo se, para todo par de pontos em M, $\forall x_1, x_2 \in M$, $\exists g \in G$, tal que $x_2 = gx_1$. Ademais, se G é transitivo na variedade M, M é dito ser um transitivo transitivo

Essa terminologia deriva do fato de que, se P é uma propriedade na variedade M, que é invariante para qualquer elemento $g \in G$, digamos, uma função $P: M \to R$, tal que Pg = P, $\forall g \in G$; então, P é constante em M. De fato, para todos os pontos x_1 e x_2 , temos $x_2 = gx_1$ para algum $g \in G$; assim, $P(x_2) = P(gx_1) = P(x_1)$.

A título de exemplos, podemos dizer que o Grupo Especial Unitário, SU(n), com Ação dada pela multiplicação matricial padrão, é transitivo na esfera complexa S_C^{n-1} ,

encarada como uma variedade. Temos, também, que a norma de um vetor v é uma propriedade que é invariante para todo elemento $X \in SU(n)$, pois $\|Xv\| = \|v\|$, e é constante (igual a 1) na esfera S_C^{n-1} .

5 CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO

A Teoria de Controle Ótimo fornece conceitos interessantes e um ferramental poderoso, os quais podem ser aplicados no controle de sistemas quânticos. Em linhas gerais, o Controle Ótimo se debruça sobre o problema de controlar um sistema $\dot{x} = f(x,u)$ e minimizar, simultaneamente, um funcional do estado x e do controle u. Problemas de controle de sistemas quânticos podem ser formulados de forma natural dentro do arcabouço teórico de Controle Ótimo.

Um dos problemas de controle ótimo mais importantes é aquele relacionado com a transferência do estado do sistema para um certo estado-alvo desejado em um tempo mínimo. No contexto quântico, tal problema é de crucial importância. Com efeito, uma das maiores dificuldades de natureza operacional em sistemas quânticos reside no fato de que os mesmos são muito sensíveis à presença do ambiente exterior, o qual freqüentemente destrói as principais características quânticas, que são fundamentais, por exemplo, para a implementação de sistemas de processamento de Informação Quântica, bem como para a viabilidade da Computação Quântica. Trata-se do problema de Decoerência (SCHLOSSHAUER, 2008), (NIELSEN; CHUANG, 2010). Assim, um método que pode ser empregado para contornar a decoerência é obter a transferência desejada de estados no menor tempo possível, de sorte que interação com o ambiente torne-se desprezível.

O tratamento de problemas de controle ótimo vale-se de diferentes ferramentas matemáticas, dependendo se há ou não um limite prescrito para a magnitude do controle. Para controles ilimitados, o problema de controle ótimo de tempo não existe. No entanto, os teoremas de existência de Fillippov garantem que o controle ótimo de transição de estados em tempo mínimo existe sob as hipóteses de controlabilidade, ou seja, a existência de um controle que realize a meta desejada, funções de controle mensuráveis no sentido de Lebesgue, assumindo valores em um conjunto compacto, e funções que descrevem a dinâmica suaves (D'ALESSANDRO, 2007).

De forma rara, e, tipicamente, apenas para casos de dimensionalidade baixa, com simetrias especiais, a solução de um problema de controle ótimo pode ser obtida explícita e analiticamente, na forma de uma dada função do tempo. Muito mais freqüentemente, e, em particular para sistemas de maior dimensionalidade, como, por exemplo, em problemas de controle de dinâmicas moleculares, algoritmos numéricos e iterativos são utilizados a fim de se encontrar o controle ótimo apropriado.

5.1 FORMULAÇÃO GERAL DO PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO

O problema genérico em Controle Ótimo, com o qual normalmente se depara na Teoria de Controle convencional, diz respeito a encontrar uma função de controle admissível $u^{*}(t)$ que faz com que o sistema dinâmico de interesse siga uma trajetória admissível $x^{*}(t)$, de modo a minimizar uma determinada medida de desempenho ou funcional de custo.

Pode-se formular o problema como se segue. Dado um conjunto X de funções de estado x(t) a valores vetoriais, com $t \in \Re: \left[t_0, t_f\right]$, $x:\Re \to \Re^n$, e um conjunto U de funções de controle u(t), tais que $u:\Re \to \Re^m$, encontrar as funções $x \in X$ and $u \in U$ para o sistema dinâmico x = f(x(t), u(t)), com f sendo um campo vetorial suave, de modo a minimizar um funcional de custo $J: X \times U \to \Re$ da forma:

$$J(u) = h(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} g(x(t), u(t), t) dt$$
 (5.1.1),

em que h e g são funções suaves dependendo das variáveis x(t), u(t), e do valor de $x(t_f)$, tais que $h: \Re^n \times \Re \to \Re$ e $g: \Re^n \times \Re^m \times \Re \to \Re$, respectivamente. Tais funções são escolhidas judiciosamente tendo em vista o particular problema de controle ótimo que se deseja resolver.

De modo geral, todo problema de Controle Ótimo pode ser formulado como um caso particular do problema geral acima estabelecido.

Consideremos, inicialmente, como caso especial, que desejamos encontrar um dado controle u, contínuo por partes, a fim de direcionar o estado x de x = f(x(t), u(t)), de um estado inicial x_0 para um estado desejado x_f em um tempo T. Então, U é o conjunto dos de funções de controle u(t), contínuas por partes, definidas no intervalo real [0,T]; e, X, o conjunto das funções contínuas x(t), definidas no mesmo intervalo, satisfazendo a condição inicial $x(0) = x_0$; sendo que o funcional de custo que procuramos minimizar é da forma:

$$J(u) = ||x(T) - x_f||^2$$
 (5.1.2),

ou seja, trata-se da minimização da distância entre o estado final e o estado desejado, em um tempo *T*.

Podemos também incorporar ao funcional de custo um termo que leve em consideração a energia gasta (pelo esforço de controle) durante o dado intervalo de tempo. Assim, seja um funcional de custo da seguinte forma:

$$J(u) = \lambda ||x(T) - x_f||^2 + \int_0^T ||u(t)||^2 dt$$
 (5.1.3),

em que, λ é uma constante real e $\lambda > 0$. Desta forma, incorporamos uma penalidade no estado final e uma energia como termo para o controle. Pode-se aumentar ou diminuir λ , se deseja-se ou não empregar mais energia para obter um estado final melhor, ou seja, mais próximo do estado desejado, ou não.

Conforme já antecipado por nós, os funcionais (5.1.2) e (5.1.3) consistem em casos especiais do problema geral de Controle Ótimo, estabelecido ao início desta

Seção. Com efeito, a expressão (5.1.1) define o assim chamado "Problema de Bolza" na Teoria de Controle Ótimo, o qual compreende os dois casos particulares, a saber, o "Problema de Mayer" e o "Problema de Lagrange", correspondendo a impor g(x(t),u(t)) ou $h(x(t_i))$ como sendo zero, respectivamente. Exemplos de problemas de Mayer são problemas de tempo mínimo, nos quais a meta de controle é levar o estado do sistema a um dado estado-alvo em tempo mínimo. Neste caso, o conjunto de controles admissíveis consiste naqueles que direcionam a dinâmica desta maneira. O problema de Lagrange, por sua vez, descreve uma situação na qual o custo de controle acumulase com o tempo. Este é o caso, por exemplo, quando se deseja minimizar a energia usada durante a ação de controle e/ou a distância média da trajetória da condição inicial a um dado ponto no espaço de estados. Finalmente, o problema de Bolza, uma vez sendo a combinação de ambos os casos particulares, surge quando há um custo cumulativo que aumenta durante a ação de controle, mas se coloca ênfase também na situação do sistema no tempo final.

5.2 EXTENSÃO PARA SISTEMAS QUÂNTICOS

Em sistemas de controle quântico, podemos considerar como estado x a matriz de densidade ρ , o vetor de estados puro $|\psi\rangle$, ou ainda o operador de evolução temporal $\hat{U}(t,t_0)$, que satisfaz a equação básica de evolução temporal da Mecânica Quântica, a equação de Schrödinger. Conforme já visto, sua forma controlada pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(u(t)) |\psi(t)\rangle \quad (5.2.1),$$

em que se destaca a dependência do operador hamiltoniano das funções de controle u(t).

Um funcional genérico de custo, do tipo Bolza, pode ser escrito como:

$$J(u(t)) = h(|\psi(T)\rangle, T) + \int_{0}^{T} g(|\psi(t)\rangle, u(t), t) dt \qquad (5.2.2).$$

Alternativamente, pode-se pensar em um funcional de custo expresso em termos do valor esperado das funções f e g, para um dado estado quântico ψ , vistas como funções dependentes de operadores na representação de Heisenberg, ou seja, operadores que variam no tempo (com estados quânticos fixos). Destarte, tal funcional de custo se escreveria como:

$$J(\hat{u}(t)) = \langle \psi | h(\hat{x}(T), \hat{u}(T), T) | \psi \rangle + \int_{0}^{T} \langle \psi | g(\hat{x}(t), \hat{u}(t), t) | \psi \rangle dt \quad (5.2.3),$$

sendo, neste caso, considerada uma dependência funcional, por exemplo, dos operadores posição $\hat{x}(t)$ e esforço de controle $\hat{u}(t)$, o qual, fisicamente pode corresponder a um campo elétrico aplicado no sistema, sem ou com dependência da posição, dada pelo operador $\hat{x}(t)$.

Voltando a atenção novamente para a equação de Schrödinger controlada (5.2.1) e para o funcional de custo (5.2.2), e considerando-se o caso de sistemas quânticos discretos, ou seja, com um espectro finito de autovalores, tanto o estado $|\psi(t)\rangle$, como o operador $-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(u(t))$, dado no caso discreto por uma matriz hermiteana, são quantidades complexas. Para expressar o problema em termos de quantidades reais apenas, pode-se escrever:

$$|\psi\rangle = |\psi_R\rangle + i|\psi_I\rangle$$
 (5.2.4);

$$-i\hat{H}(u) = R(u) + iI(u)$$
 (5.2.5);

de modo a separar, nas partes real e complexa, o estado e o operador hamitoniano, respectivamente. Assim, $|\psi_R\rangle$ e $|\psi_I\rangle$ são agora vetores reais de dimensão n, e R(u) e I(u), funções matriciais $n \times n$ de u(t). Substituindo-se as equações (5.2.4) e (5.2.5) em (5.2.1), e separando-se as partes real e imaginária, obtemos as duas equações diferenciais reais:

$$\frac{d}{dt}\psi_R = R(u)\psi_R - I(u)\psi_I \qquad (5.2.6);$$

$$\frac{d}{dt}\psi_I = I(u)\psi_R + R(u)\psi_I \qquad (5.2.7).$$

Definindo-se:

$$x = \begin{bmatrix} \psi_R^T & \psi_I^T \end{bmatrix}^T \qquad (5.2.8);$$

$$\widetilde{H}(u) \equiv \begin{pmatrix} R(u) & -I(u) \\ I(u) & R(u) \end{pmatrix}$$
 (5.2.9);

podemos escrever a equação diferencial que descreve a dinâmica do sistema, envolvendo apenas quantidades reais, como:

$$\dot{x} = \widetilde{H}(u)x \qquad (5.2.10),$$

expressando o sistema em uma linguagem mais próxima daquela empregada comumente em Sistemas Dinâmicos 20 . Ademais, $\widetilde{H}(u)$ resulta anti-simétrico para todo u(t) e pertence ao grupo SO(2n) \cap SP(n) (D'ALESSANDRO, 2007).

Uma simples mudança de escala permite restaurar a constante fundamental da Mecânica Quântica, com dimensão de ação (energia \times tempo), \hbar .

O funcional de custo pode ser reescrito na forma:

$$J(u(t)) = \widetilde{h}(x(T),T) + \int_{0}^{T} \widetilde{g}(x(t),u(t),t)dt \qquad (5.2.11),$$

para funções apropriadas \widetilde{h} e \widetilde{g} .

A título de exemplos, em aplicações de controle molecular, uma escolha comum de funcional é dada por:

$$J(u(t)) = k \int_{0}^{T} u^{2}(t)dt$$
 (5.2.12);

com uma constante real, k > 0, a qual mede a energia do campo elétrico aplicado no intervalo [0,T].

Outra possibilidade é escolher um custo do tipo:

$$J(u(t)) := k \int_{0}^{T} \left(\frac{du(t)}{dt}\right)^{2} dt$$
 (5.2.13);

o qual filtra as componentes de alta freqüência do campo de controle; sendo k uma constante real, k > 0.

Quando a ênfase é colocada em um determinado estado final, pode-se minimizar um funcional de custo (tipo Bolza) na forma:

$$J(u(t)) = \lambda ||x(T) - x_F||^2 + \int_0^T ||u(t)||^2 dt$$
 (5.2.14);

ou, ainda, na forma:

$$\frac{1}{2}\langle O \rangle_{\psi} + \frac{k}{2} \int_{0}^{T} u^{2}(t) dt = \frac{1}{2} \psi^{\dagger} O \psi + \frac{k}{2} \int_{0}^{T} u^{2}(t) dt$$
 (5.2.15),

com k > 0; no qual, O é uma matriz hermiteana e negativa-definida (D'ALESSANDRO, 2007). Por exemplo, se ψ_F é o estado desejado, pode-se escolher $O = -\psi_F \psi_F^{\dagger}$.

5.3 CONDIÇÕES NECESSÁRIAS DE OPTIMALIDADE

Em toda derivação de condições necessárias de optimalidade, assume-se que o controle admissível $u^*(t)$, obtido, é ótimo e substitui u(t) com um controle ligeiramente diferente u^{ϵ} , no qual ϵ é um parâmetro pequeno. O controle u^{ϵ} é, ainda, admissível, e, do ponto de vista variacional, é chamado de uma variação de u(t). Então, impõe-se que, para o funcional de custo J, J = J(u):

$$J(u^{\varepsilon}) - J(u) \ge 0$$
 (5.3.1);

o qual dá as condições necessárias desejadas ao controle u. De acordo com o tipo de variação que se considera, diferentes condições de optimalidade são obtidas. Em primeira instância, podemos ter uma variação dita *fraca* de u(t), a qual pode ser expressa em linguagem variacional como se segue:

$$u^{\varepsilon}(t) = u(t) + \varepsilon v(t)$$
 (5.3.2);

em que, ε é um parâmetro real, pequeno; e, v(t), uma função contínua arbitrária, com as mesmas condições de contorno de u(t).

As condições necessárias básicas de optimalidade²¹, em Controle Ótimo, são conhecidas como o Princípio do Máximo de Pontryagin (PMP), o qual pode ser encontrado em virtualmente todos os livros dedicados à teoria de Controle Ótimo, e, até mesmo, em alguns textos sobre Cálculo das Variações, como, por exemplo, em (GELFAND, FOMIN, 2000). Neles, a abordagem do Princípio do Máximo de Pontryagin varia bastante em termos de apresentação, notação, detalhamento, sofisticação e rigor matemático empregados. Em (KIRK, 1970), texto clássico e bastante empregado em cursos de Controle Ótimo, o PMP é apresentado de forma mais informal, tendo em vista estudantes de Engenharia como público-alvo, de modo que o autor apresenta uma dedução heurística do Princípio. A referência original, geralmente citada na bibliografia de diversos autores, é o livro-texto, traduzido para o inglês, do próprio matemático soviético Lev S. Pontryagin e seus colaboradores (PONTRYAGIN et al., 1962), a qual se constitui em um tratamento extenso e rigoroso da Teoria de Otimização de Processos. Uma abordagem moderna, minuciosa e matematicamente rigorosa do PMP pode ser encontrada no livro-texto de Schättler e Ledzewicz (2012), o qual apresenta o Princípio em seu Capítulo 2, para finalmente prová-lo de forma detalhada e rigorosa no Capítulo 4.

Seguiremos, no entanto, a abordagem de (D'ALESSANDRO, 2007), a qual se presta melhor aos nossos propósitos, inclusive, no tocante à aplicação do PMP para problemas de Controle Quântico Ótimo. Destarte, definamos, a seguir, a chamada variação forte de u^{ℓ} , a qual será utilizada para a nossa dedução do PMP. Fixando $\tau \in]0,T]$, então, u^{ℓ} é uma função igual a u(t) para $t \in [0,\tau-\varepsilon]$ e para $t \in]\tau,T]$, e constante e igual a v para $t \in]\tau-\varepsilon,\tau]$. O valor v é qualquer valor admissível no conjunto de valores admissíveis para o controle, $U \subseteq \mathfrak{R}^m$. O controle u^{ℓ} é, então, uma função no tempo que apresenta uma descontinuidade no intervalo acima definido.

-

Condições necessárias, porém, não suficientes, de modo que se pode encontrar um controle admissível u^* , que satisfaça as condições do PMP, em outras palavras, que seja um extremante das condições variacionais nele estabelecidas, mas que não seja o controle ótimo global (KIRK, 1970), (SCHÄTTLER; LEDZEWICZ, 2012).

Antes de enunciarmos o PMP e deduzirmos as condições de optimalidade decorrentes do mesmo, convém que esclareçamos a notação utilizada. As variáveis em subscrito, que se seguem a uma determinada função, indicam diferenciação desta função com relação à variável respectiva. Consiste em uma notação mais enxuta e moderna, utilizada, por exemplo, em textos modernos de equações diferenciais parciais, como (EVANS, 2010); e, mesmo em livros de Controle Ótimo recentes, como no excelente (SCHÄTTLER; LEDZEWICZ, 2012), já mencionado.

Enunciemos, então, o seguinte:

Teorema: Princípio do Princípio do Máximo de Pontryagin para Problemas de Mayer. (Fixado o tempo final e o estado final livre).

Assuma que u é o controle ótimo e x a trajetória, que é a solução do sistema $\dot{x} = f(x, u)$. Então, existe um vetor não nulo λ que é solução das equações adjuntas:

$$\dot{\lambda}^T = -\lambda^T f_x(x(t), u(t)) \quad \text{(5.3.3)},$$

com condição de término $\lambda^T(T) = -\phi_x(x(T))^{22}$, tal que, $\forall \tau \in]0,T]$, temos:

$$\lambda^{T}(\tau) f(x(\tau), u(\tau)) \ge \lambda^{T}(\tau) f(x(\tau), \nu)$$
 (5.3.4),

para todo ν no conjunto dos valores admissíveis para o controle - U. O vetor de estado λ é chamado de co-estado.

Se não há limite no valor possível do controle u, a equação (5.3.3) pode ser substituída por:

Pode-se suprimir o argumento T na função ϕ , desde que o tempo final T é fixado.

$$\frac{\partial(\lambda^T f(x,u))}{\partial u} = \lambda^T f_u(x,u) = 0 \quad (5.3.5).$$

Neste caso, a condição necessária de optimalidade pode ser obtida usando uma variação fraca do controle. A mesma é definida, conforme vimos, como: $u(t) \rightarrow u^{\varepsilon}(t) \equiv u(t) + \varepsilon v(t)$, em que v(t) é uma dada função. Se nós denotamos por x^{ε} a trajetória correspondente para u^{ε} , com ε pequeno, temos, então, para um problema de Mayer:

$$\Delta J \equiv J(x^{\varepsilon}(T)) - J(x(T)) \approx \phi_{x}(x(T))(x^{\varepsilon}(T) - x(T)) \quad (5.3.6).$$

Definindo: $z(t) \equiv \frac{d}{d\varepsilon} x^{\varepsilon}(t) |_{\varepsilon=0}$, temos:

$$x^{\varepsilon}(T) - x(T) \approx z(T)\varepsilon$$
 (5.3.7);

de modo que, aplicando-se (5.3.7) em (5.3.6), obtemos:

$$\Delta J \approx \phi_{\rm r}(x(T))z(T)\varepsilon$$
 (5.3.8).

Consideremos, agora, a equação diferencial para x^{ε} :

$$\dot{x}^{\varepsilon} = f(x^{\varepsilon}, u + \varepsilon v) \quad (5.3.9).$$

Uma equação diferencial para z(t) é obtida diferenciando-se (5.3.9) com respeito a ε , em ε = 0, e intercambiando a ordem de diferenciação entre o tempo t e ε . Com isso, obtém-se:

$$\dot{z} = f_x(x, u)z + f_u(x, u)v$$
 (5.3.10),

com condição inicial z(0) = 0.

A partir das equações adjuntas, (5.3.3), ou seja, aquelas para o co-estado λ : $\dot{\lambda}^T = -\lambda^T f_x(x(t), u(t))$, com condição final $\lambda^T(T) = -\phi_x(x(T))$, podemos reescrever (5.3.8) como:

$$\Delta J \approx -\lambda^T(T)z(T)\varepsilon$$
 (5.3.11).

Desde que tenhamos z(0) = 0, podemos escrever $\lambda^{T}(T)z(T)$ como:

$$\lambda^{T}(T)z(T) = \int_{0}^{T} \frac{d}{dt} \lambda^{T}(t)z(t)dt \quad (5.3.12);$$

de modo que, a partir de (5.3.12), (5.3.10) e (5.3.3), combinadas, resulta em:

$$\lambda^{T}(T)z(T) = \int_{0}^{T} \lambda^{T}(t) f_{u}(x(t), u(t)) v(t) dt$$
 (5.3.13).

Este resultado, (5.3.13), combinado com a expressão (5.3.11), fornece-nos, por fim, a equação variacional para o funcional de custo *J*:

$$\Delta J \approx -\varepsilon \int_{0}^{T} \lambda^{T}(t) f_{u}(x(t), u(t)) v(t) dt \qquad (5.3.14).$$

Assim, se u é um mínimo local para J, ou seja, um extremante, então, não é possível, por uma escolha arbitrária da perturbação v(t), obter um valor menor. Como é uma função contínua qualquer, pelo Lema Fundamental do Cálculo das Variações

(GELFAND, FOMIN, 2000) ²³, o integrando deve ser nulo, de modo que, obrigatoriamente, deve-se ter:

$$\lambda^{T}(t) f_{u}(x(t), u(t)) = 0$$
 (5.3.15);

ou, equivalentemente,

$$\frac{\partial \left(\lambda^T f(x, u)\right)}{\partial u} = \lambda^T f_u(x, u) = 0 \quad (5.3.16).$$

Essas são condições de optimalidade do Princípio do Máximo de Pontryagin.

No entanto, o Teorema do PMP é mais freqüentemente formulado e utilizado da seguinte maneira. Define-se uma função, chamada de *Hamiltoniano do Controle Ótimo*, da forma ²⁴:

$$h = h(\lambda, x, u) \equiv \lambda^{T} f(x, u) \quad (5.3.17).$$

Para cada λ e x, maximiza-se essa função sobre $u \in U$, isto é, u é escolhido, de modo que:

$$h(\lambda, x, u) \ge h(\lambda, x, v)$$
 (5.3.18),

para todos λ e x, e para todo $v \in U$, de forma análoga à condição (5.3.4): $\lambda^T(\tau) f(x(\tau), u(\tau)) \ge \lambda^T(\tau) f(x(\tau), v)$.

²³ Fundamentos básicos de Cálculo das Variações serão apresentados e discutidos no Capítulo 7.

²⁴ Valer-nos-emos da notação *h*, com a letra minúscula, para evitar confusão com o Operador Hamiltoniano - *H* - da Mecânica Quântica. Veremos, adiante, que, em problemas de Controle Quântico Ótimo, ambos estarão relacionados do ponto de vista das condições de optimalidade do PMP.

Este é um problema de otimização estática para todos os valores dos parâmetros λ e x. A solução irá depender desses parâmetros, e podemos escrevê-la como $u \equiv u(x,\lambda)$. Agora, ao inserir essa forma de u nas equações $\dot{x} = f(x,u)$ e $\dot{\lambda}^T = -\lambda^T f_x(x(t),u(t))$, obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\dot{x} = f(x, u(x, \lambda))$$
 (5.3.19);

$$\dot{\lambda}^T = -\lambda^T f_x(x, u(x, \lambda)) \quad (5.3.20);$$

as quais têm que ser solucionadas com as condições de contorno $x(0) = x_0$ e $\lambda^T(T) = -\phi_x(x(T))$.

Este é, portanto, um problema de condições de contorno de dois pontos, na medida em que as mesmas são definidas nos tempos t=0 e t=T, para (5.3.19) e (5.3.20), respectivamente. Em geral, deixa-se a condição inicial para o co-estado λ , $\lambda(0)$, como um parâmetro livre, e resolvem-se as equações (5.3.19) e (5.3.20), e então, tenta-se ajustar o valor do parâmetro $\lambda(0)$, de modo a satisfazer a condição $\lambda^T(T) = -\phi_x(x(T))$.

Todo controle que é obtido através deste procedimento satisfaz as condições necessárias de optimalidade, e, logo, é um candidato a ser o controle ótimo. Todo controle que satisfaz as condições necessárias de optimalidade é chamado de um extremo ou extremante.

Comparando-se os custos obtidos com os vários extremos (ou extremantes), encontra-se o custo mínimo, e, destarte, o controle ótimo. Esse procedimento pode, tipicamente, ser levado a cabo, de forma analítica, apenas para problemas de baixa dimensão, ou problemas que possuam simetrias especiais (D'ALESSANDRO, 2007).

O procedimento acima deduzido assume que um controle ótimo existe 25 . Teoremas de existência de controles ótimos podem ser dados sob certas condições na equação $\dot{x} = f(x,u)$ e também no conjunto de funções de controle admissíveis, as quais assumimos, aqui, incluir, no mínimo, o conjunto de funções contínuas por partes. Com efeito, isso nos permitiu usar uma variação forte de u^{f} como um controle admissível.

Consideremos, agora, o caso mais geral em que se tem um Problema de Bolza, com um estado final livre, ao invés de um Problema de Mayer. As condições do Princípio do Máximo de Pontryagin podem ser facilmente adaptadas, a fim de abarcar este caso. Definindo-se, para tanto, uma variável extra:

$$y(t) \equiv \int_{0}^{t} L(x(s), u(s), s) ds$$
 (5.3.21),

o funcional de custo, definido pela expressão:

$$J(u) = \phi(x(T)) + \int_{0}^{T} L(x(s), u(s), s) ds$$
 (5.3.22),

pode ser reescrito na forma de Mayer como se segue:

$$J(u) = \overline{\phi}(x(T), y(T)) \equiv \phi(x(T)) + y(T)$$
 (5.3.23).

O co-estado das equações adjuntas tem, agora, dimensão n+1. Se nós chamarmos de λ as primeiras n componentes do co-estado, e de μ as componentes remanescentes, as equações adjuntas tomam a forma:

_

²⁵ Teoremas de existência de controles ótimos podem ser encontrados em (FLEMING; RISHEL, 1982).

$$\dot{\lambda}^{T} = -\lambda^{T} f_{x} - \mu L_{x}$$
 (5.3.24);

$$\dot{\mu} = 0$$
 (5.3.25).

Então, μ é constante, e desde que, $\mu(T) = -\overline{\phi}_y = -1$, temos que a condição $h(\lambda, x, u) \geq h(\lambda, x, v)$ pode ser reescrita com o novo Hamiltoniano de Controle Ótimo, definido por:

$$h(\lambda, x, u) \equiv \lambda^{T} f(x, u) - L(x, u) \quad (5.3.26).$$

Em suma, para um Problema de Bolza, caracterizado pelo funcional:

$$J(u) = \phi(x(T), T) + \int_{0}^{T} L(x(t), u(t), t) dt$$
 (5.3.27),

com o tempo final fixado e o estado final livre, se u é ótimo, então ele satisfaz a inequação $h(\lambda, x, u) \ge h(\lambda, x, v)$, com h dado por (5.3.26). O vetor λ satisfaz a primeira equação do sistema de equações adjuntas, (5.3.24) - $\dot{\lambda}^T = -\lambda^T f_x - \mu L_x$ - com a condição de contorno terminal $\lambda^T(T) = -\phi_x(x(T))$; e, o estado x satisfaz o sistema de equações diferenciais $\dot{x} = f(x, u)$.

Passemos, doravante, a examinar as condições de optimalidade para problemas de Controle Quântico. Para o problema de Controle Ótimo, neste contexto físico, temos as seguintes expressões para um sistema quântico de dimensão finita (ou espectro discreto de autovalores), conforme já visto na Seção 5.2, e para o funcional de custo associado:

$$\dot{x} = \widetilde{H}(u)x \quad \text{(5.3.28)};$$

$$J(u) = \widetilde{\phi}(x(T), T) + \int_{0}^{T} \widetilde{L}(x(t), u(t), t) dt \quad (5.3.29).$$

O Hamiltoniano de Controle Ótimo $h(\lambda, x, u)$ toma, então, a forma:

$$h(\lambda, x, u) = \lambda^{T} \widetilde{H}(u) x - \widetilde{L}(x, u)$$
 (5.3.30).

O controle ótimo u tem que satisfazer $h(\lambda, x, u) \ge h(\lambda, x, v)$ com tal Hamiltoniano. As equações adjuntas são:

$$\dot{\lambda}^T = -\lambda^T \widetilde{H}(u) + \widetilde{L}_v \quad (5.3.31),$$

as quais, desde que $\widetilde{H}(u)$ seja anti-simétrico, podem ser escritas como:

$$\dot{\lambda} = \widetilde{H}(u)\lambda + \widetilde{L}_{x}^{T} \quad \text{(5.3.32)},$$

com a condição terminal dada por $\lambda(T) = -\widetilde{\phi}_x^T(x(T))$. Note que, se $\widetilde{L}_x \equiv 0$, isto é, o integrando do funcional de custo (5.3.29) não dependa do estado x, x e λ satisfazem a mesma equação diferencial, e as equações para λ e x são acopladas apenas através dos controles.

Ilustremos, agora, a aplicação do Princípio do Máximo de Pontryagin para a obtenção de um controle ótimo em um sistema quântico de 2 níveis, a saber o controle de uma partícula de spin ½ submetida a um campo magnético variante no tempo.

Muitas partículas quânticas como elétrons, núcleos atômicos 26 e, mesmo, moléculas, exibem um *momento angular intrínseco*, ou *spin*, em contraposição ao momento angular orbital, \hat{L} . Em geral, se o operador $\hat{S}_{x,y,z}$ é medido, há 2j+1 resultados possíveis (autovalores): $-\hbar j$, $-\hbar (j+1)$, ..., $\hbar (j-1)$, $\hbar j$; em que j é um inteiro positivo, ou j é um meio inteiro positivo (por exemplo, 1/2, 3/2, etc), cujo valor depende do sistema em questão, de modo que é chamado de *spin do sistema* e é uma de suas propriedades intrínsecas (SAKURAI, 1994), (PIZA, 2003), (WEINBERG, 2012).

O exemplo mais simples de um sistema de controle envolvendo partículas com spin é o de uma única partícula, de spin ½, a qual interage com um campo magnético externo \vec{B}_e . Assume-se que o campo \vec{B}_e varia apenas no tempo, de modo a fazer o papel do esforço de controle u(t) do sistema. Todos os outros graus de liberdade são desconsiderados em tal modelo. Assim, no Hamiltoniano associado ao sistema, o único termo relevante é aquele que modela a interação do momento angular spin $\hat{S} \equiv [\hat{S}_x \quad \hat{S}_y \quad \hat{S}_z]$ com o campo externo $\vec{B}_e(t) \equiv [B_x(t) \quad B_y(t) \quad B_z(t)]$.

Destarte, o Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ pode ser escrito como:

$$\hat{H}(t) = \gamma \hat{S}.\vec{B}_{e}(t) = \gamma \left(\hat{S}_{x}B_{x}(t) + \hat{S}_{y}B_{y}(t) + \hat{S}_{z}B_{z}(t)\right)$$
 (5.3.33);

para um fator de proporcionalidade y, chamado de razão giromagnética.

Tal Hamiltoniano, expresso por (5.3.33), aparece frequentemente em experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (NMR) e de Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR), nos quais um campo magnético externo de magnitude senoidal é aplicado a uma partícula carregada. Apenas senóides de uma dada

-

O estado quântico de um núcleo atômico é determinado por sua massa (ou, equivalentemente, energia), por seu spin e por sua paridade. Em um núcleo atômico, o spin é o momento angular total de todos os núcleons constituintes, incluindo seus spins. Depende da paridade e do alinhamento dos momentos angulares e dos spins de cada núcleon (BASDEVANT; RICH; SPIRO, 2005).

freqüência induzem uma transição de estados. Essa freqüência contém a informação da natureza da partícula em questão, uma vez que dela depende o parâmetro γ. Esse método tem tido importantes aplicações nas últimas décadas, sendo que a introdução de idéias oriundas da Teoria de Controle neste contexto é recente (D'ALESSANDRO, 2007). Atualmente, partículas com spin têm sido propostas como os componentes básicos de computadores quânticos. Ademais, partículas de spin ½, em especial, são particularmente interessantes, quando se visa utilizar seus estados quânticos como bits quânticos ou *qubit*s na Teoria de Informação Quântica (NIELSEN; CHUANG, 2000), (BOUWMEESTER; EKERT; ZEILINGER, 2000), (VEDRAL, 2007), (LISBOA; PIQUEIRA, 2011).

Seja, então, a equação de Schrödinger que descreve uma partícula de spin ½ em um campo magnético externo dependente do tempo, com o operador Hamiltoniano dado por (5.3.33):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = \gamma \left(\hat{S}_x B_x(t) + \hat{S}_y B_y(t) + \hat{S}_z B_z(t) \right) \varphi \rangle \quad (5.3.34).$$

Uma vez que a representação matricial dos operadores Spin - \hat{S}_x , \hat{S}_y e \hat{S}_z - nas direções x, y e z, respectivamente, é dada pelas Matrizes de Pauli σ_x , σ_y e σ_z , multiplicadas pelo fator $\hbar/2$, que corresponde ao módulo do autovalor dos spins (SAKURAI, 1994), (PIZA, 2003), (WEINBERG, 2012), podemos reescrever (5.3.34) como:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi\rangle = \gamma \frac{\hbar}{2} (\sigma_x B_x(t) + \sigma_y B_y(t) + \sigma_z B_z(t)) |\varphi\rangle \quad (5.3.35);$$

na qual utilizamos a notação d/dt para a derivação no tempo, uma vez que o Hamiltoniano só depende do tempo (em outras palavras, a equação diferencial a derivadas parciais de Schrödinger reduziu-se a uma equação diferencial ordinária de

primeira ordem no tempo). Após cancelarmos a constante \hbar , e, mediante um ajuste apropriado de unidades, de escala do tempo e de uma mudança de notação para as componentes do campo magnético externo, dependente do tempo, reescrevemos (5.3.35) da seguinte forma:

$$|\dot{\psi}(t)\rangle = (\overline{\sigma}_x u_x(t) + \overline{\sigma}_y u_y(t) + \overline{\sigma}_z u_z(t))\psi(t)\rangle$$
 (5.3.36);

em que, $\overline{\sigma}_x$, $\overline{\sigma}_y$ e $\overline{\sigma}_z$ são as matrizes múltiplas das Matrizes de Pauli por um fator *i/2*:

$$\overline{\sigma}_{x} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (5.3.37a);$$

$$\bar{\sigma}_{y} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.3.37b);

$$\overline{\sigma}_z \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$
 (5.3.37c);

as quais satisfazem as relações de comutação idênticas às relações de comutação das Matrizes de Pauli originais (SAKURAI, 1994), (PIZA, 2003), (WEINBERG, 2012):

$$[\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y] = \overline{\sigma}_z$$
 $[\overline{\sigma}_y, \overline{\sigma}_z] = \overline{\sigma}_x$ $[\overline{\sigma}_z, \overline{\sigma}_x] = \overline{\sigma}_y$ (5.3.38a,b,c).

As magnitudes u_x , u_y e u_z representam as componentes x, y e z, respectivamente, do campo magnético usado para controle. Assumindo que a componente z é mantida constante, um possível funcional de custo a ser minimizado é da forma:

$$J(u_{x}, u_{y}) = -\operatorname{Re}(\langle \psi(T) | \psi_{f} \rangle) + \eta \int_{0}^{T} u_{x}^{2}(t) + u_{y}^{2}(t) dt \quad (5.3.39),$$

no qual, $\eta > 0$ é uma constante, e $\left|\psi_{f}\right\rangle$ corresponde ao estado final desejado. O custo acima expressa um compromisso entre a meta de transferir o estado para $\left|\psi_{f}\right\rangle$ e a meta de manter a energia do campo, expressa pela integral em (5.3.39), pequena. Mais importância é atribuída à segunda meta se o parâmetro η é grande.

Transformando este problema em um real, de acordo com o procedimento visto na Seção anterior, a equação dinâmica é escrita como:

$$\dot{x} = (T_{y}u_{x}(t) + T_{y}u_{y}(t) + T_{z}u_{z})x$$
 (5.3.40);

em que, as matrizes T_x , T_y e T_z são dadas, respectivamente, por:

$$T_{x} := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.3.41a);

$$T_{y} := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.3.41b);

$$T_z := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.3.41c).

Essas matrizes satisfazem as relações de comutação:

$$[T_x, T_y] = T_z$$
 $[T_y, T_z] = T_x$ $[T_z, T_x] = T_y$ (5.3.42a,b,c);

de modo que a aplicação ou mapa correspondente a $\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y, \overline{\sigma}_z \leftrightarrow T_x, T_y, T_z$ é um isomorfismo da álgebra de Lie associada (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999). O custo dado em (5.3.39) pode ser escrito, denotando por x_f o vetor real de dimensão 2n, correspondente a $|\psi_f\rangle$:

$$J(u_x, u_y) = -x^T(T)x_f + \eta \int_0^T u_x^2(t) + u_y^2(t)dt$$
 (5.3.43).

Agora, apliquemos o Principio do Máximo de Pontryagin para determinar a forma do controle ótimo neste caso. Uma vez que o integrando acima não depende do

estado x, as equações adjuntas para o co-estado λ são as mesmas que as equações para x, ou seja:

$$\dot{\lambda}(t) = \left(T_x u_x(t) + T_y u_y(t) + T_z u_z\right) \lambda(t) \quad (5.3.44).$$

O Hamiltoniano de Controle Ótimo $h(\lambda, x, u_x, u_y)$ é dado por:

$$h(\lambda, x, u_x, u_y) = \lambda^T (T_x u_x + T_y u_y + T_z u_z) x - \eta (u_x^2 + u_y^2)$$
 (5.3.45);

de modo que, a maximização com respeito às variáveis u_x e u_y , ou seja, diferenciandose (5.3.45) com relação a elas, e impondo a equação igual a zero, resulta:

$$u_x = \frac{1}{2\eta} \lambda^T T_x x$$
 (5.3.46);

$$u_{y} = \frac{1}{2\eta} \lambda^{T} T_{y} x$$
 (5.3.47).

A esta altura, poderíamos substituir colocar (5.3.46) e (5.3.47) em (5.3.40) e (5.3.44), e tentar resolver o problema de valor de contorno de dois pontos, ou seja, para as equações diferenciais para x e para λ . Uma alternativa melhor neste caso, no entanto, é, inicialmente, diferenciar (5.3.46) e (5.3.47) com relação ao tempo; e, em seguida, valer-se das expressões (5.3.40), (5.3.44) e das relações de comutação (5.3.42a,b,c), de modo que, após cálculos e manipulações algébricas, obtemos:

$$\dot{u}_{x} = \frac{1}{2\eta} \left(\lambda^{T} T_{z} x u_{y} - u_{z} u_{y} \right)$$
 (5.3.48);

$$\dot{u}_{y} = \frac{1}{2\eta} \left(-\lambda^{T} T_{z} x u_{x} - u_{z} u_{x} \right) \quad (5.3.49).$$

Um cálculo similar mostra que $\frac{d}{dt} \lambda^T T_z x = 0$, de sorte que as equações dinâmicas dos controles, (5.3.48) e (5.3.49), podem ser reescritas como:

$$\dot{u}_x = ku_y$$
 (5.3.50);

$$\dot{u}_{y} = -ku_{x}$$
 (5.3.51);

em que k é a constante dada por $k=\frac{1}{2\eta}\left(\lambda^TT_zx-u_z\right)$. Resolvendo-se o sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem acima, obtemos como solução para os controles ótimos funções trigonométricas da forma:

$$u_{x}(t) = M \cos(\omega t + \theta)$$
 (5.3.52);

$$u_{v}(t) = Msen(\omega t + \theta)$$
 (5.3.53).

Substituindo essas expressões na equação dinâmica (5.3.40) ou na (5.3.36), podemos resolver a correspondente equação diferencial resultante, com M, ω e θ como parâmetros livres, e, então, determinar os parâmetros que minimizam o funcional de custo (5.3.43) ou o (5.3.39), respectivamente.

5.4 CONTROLE ÓTIMO TEMPORAL DE SISTEMAS QUÂNTICOS

Tal problema dinâmico consiste, em linhas gerais, em direcionar o estado quântico do sistema, a partir de um estado inicial $|\psi_I\rangle$ para um estado final ou estado-alvo $|\psi_F\rangle$, no menor tempo possível, ou seja, em tempo mínimo.

Os Teoremas de Existência de Fillipov (FLEMING; RISHEL, 82) garantem que o Controle de Tempo Ótimo existe, sob as hipóteses de Controlabilidade (isto é, a existência de um controle que efetua a meta dinâmica desejada), de funções de controle que sejam mensuráveis no sentido Lebesgue ²⁷, assumindo valores em um conjunto compacto ²⁸, e de suavidade e condições de crescimento nas funções que descrevem a dinâmica. Essas condições de suavidade e de crescimento das funções que regem a dinâmica são satisfeitas por sistemas (ou modelos) de controle quântico bilineares. Um sistema de controle quântico bilinear pode ser definido como sendo aquele que pode ser descrito por um operador Hamiltoniano da forma (D'ALESSANDRO, 2007):

$$\hat{H}(u) = \hat{H}_0 + \sum_k \hat{H}_k u_k$$
 (5.4.1);

no qual, \hat{H}_0 corresponde ao Hamiltoniano do sistema livre, isto é, não controlado; e o somatório $\sum_k \hat{H}_k u_k$ corresponde aos controles aplicados ao sistema, definindo o Hamiltoniano do sistema controlado, $\hat{H}(u)$.

²⁸ Em um espaço euclidiano de dimensão finita, basta que o conjunto seja fechado e limitado para ser compacto (RUDIN, 1976), (BUCK, 1978), (PUGH, 2003). Para espaços topológicos e métricos mais gerais, faz-se necessário o desenvolvimento de conceitos e ferramentais matemáticos mais complexos para se estabelecer a compacidade (KREYSZIG, 1989), (MUNKRES, 2000), (LAX, 2002).

²⁷ Para uma introdução aos importantes conceitos matemáticos de Medida, Funções Mensuráveis e Integral de Lebesgue, recomendam-se textos de Análise Matemática, como os textos clássicos de Rudin (1976) e (1987), bem como o mais recente (PUGH, 2003), que se destaca pela abordagem mais pedagógica, mas que mantém o rigor matemático.

O problema de encontrar o controle ótimo de tempo é correlato ao problema de descrever os conjuntos alcançáveis R(t), considerando aquele limitado até um dado tempo t, de modo que o denotaremos por $R(\leq t)$, sendo que tal conjunto começa a partir de um dado estado inicial. Destarte, tem-se a seguinte:

Proposição: Consideremos o sistema dinâmico $\dot{x} = f(x,u)$, com condição inicial x_0 . Se u é o controle de tempo mínimo para alcançar o estado final ou estado-alvo x_f , T é o tempo mínimo, e x = x(t) a trajetória correspondente, para a consecução de tal meta dinâmica, então, $\forall t$, $t \in [0,T]$, x(t) pertence ao limite do conjunto alcançável $R(\leq t)$, começando do estado inicial x_0 .

Prova: Fixemos $t \in [0,T]$. Se x(t) pertence ao interior do conjunto $R(\leq t)$, então, $\exists \varepsilon > 0$, tal que $x(t+\varepsilon)$ também pertence a $R(\leq t)$. Portanto, usando outro controle e uma trajetória alternativa x_1 , é possível alcançar $x(t+\varepsilon)$ em um tempo $\tau \leq t$. Do ponto $x(t+\varepsilon)$, pode-se, então, seguir a trajetória x para o tempo $T-t-\varepsilon$, e atingir x_f no tempo $t' \leq T-\varepsilon$, o que contradiz a minimalidade de T. \square

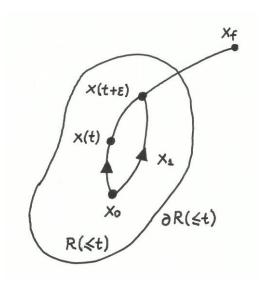


Figura 5.4.1 - Conjunto R(≤t) e as trajetórias x(t) e x₁

Para problemas de Controle Ótimo de Tempo, existe uma versão diferente do Princípio do Máximo de Pontryagin, o qual seleciona, a partir de um conjunto de controles candidatos, seus extremos ou extremantes. Entretanto, o problema é, tipicamente, muito complicado em função da necessidade de integrar um conjunto de equações diferenciais, e, então, escolher o controle que fornece o tempo mínimo.

Por essa razão, a expressão explicita de controles ótimos de tempo (ou controles de tempo ótimo) pode ser obtida apenas em casos especiais, e, tipicamente, para problemas de dimensão baixa ou reduzida. Para alguns problemas, há propriedades relevantes que simplifica a busca do controle de tempo ótimo, por exemplo, (BOSCAIN; CHAMBRION; CHARLOT, 2005).

No caso em que não se exige que os controles sejam limitados em magnitude, o controle ótimo de tempo não existe, em geral, para sistemas de controle quântico, e, então, deve-se procurar um controle que resulte em um tempo mínimo para a transição de estados, ou, ainda, que o tempo seja suficientemente pequeno, adequado aos propósitos dinâmicos desejados (D'ALESSANDRO, 2007).

Tal situação não é muito realista do ponto de vista fenomenológico e de aplicações, pois, em geral, há limitações da energia empregada no controle. Não obstante, do ponto de vista matemático, controles de tempo mínimo com esforços de controle ilimitados podem ser encontrados analiticamente, ou seja, resolvidos de forma explícita, através da Teoria de Espaços Riemannianos Simétricos, Teoria de Grupos de Lie, Decomposições de Cartan de Grupos de Lie e Classificação de Cartan de Espaços Simétricos. Ao leitor interessado em tal tratamento, sugerimos a seção 6.4.2 de (D'ALESSANDRO, 2007) e algumas referências lá citadas, como (KHANEJA; BROCKETT; GLASER, 2001), (KHANEJA; GLASER, 2001) e (KHANEJA; BROCKETT; GLASER, 2002).

Para problemas de Controle Ótimo de Tempo, tem-se a seguinte versão do Princípio do Máximo de Pontryagin que estipula condição analógas às do Teorema da

Seção 5.3, com a diferença de que a condição terminal $\lambda^T(T) = -\phi_x(x(T))$, sobre o valor final do co-estado, é, agora, substituída por $x(T) = x_f$. Lembrando-se que, para um problema de controle ótimo de tempo, fixaram-se as condições inicial e final para o estado x, e deixou-se o tempo final livre, a fim de ser minimizado. Temos, assim, o seguinte:

Teorema 5.4.1: Considere o problema de direcionar o estado x do sistema $\dot{x} = f(x,u)$ de uma condição inicial x_0 para uma condição final x_f em tempo mínimo. Considere uma função de controle $u \equiv u(t)$, integrável segundo Lebesgue, tal que, para quase todo t, $u(t) \in U$, $U \subseteq \mathfrak{R}^m$, sendo U um conjunto compacto. Se u(t) é o controle ótimo de tempo, no intervalo [0,T], então, existe um vetor n-dimensional de funções λ , chamado de co-estado, não identicamente nulo, e que satisfaz a equação adjunta:

$$\dot{\lambda}^T = -\lambda^T f_x(x, u) \quad (5.4.1).$$

Defina o Hamiltoniano de Controle Ótimo como:

$$h(\lambda, x, u) \equiv \lambda^T f(x, u)$$
 (5.4.2).

Então, $\forall t \in [0,T]$,

$$h(\lambda(t), x(t), u(t)) \ge h(\lambda(t), x(t), v)$$
 (5.4.3),

 $\forall v \in U$. Ademais, $h(\lambda(t), x(t), u(t))$ é constante ao longo de uma trajetória ótima.

Para os Sistemas de Controle Quântico, como os que têm sido vistos, o estado x e o co-estado λ satisfazem a mesma equação diferencial $\dot{\lambda} = \tilde{H}(u)\lambda + \tilde{L}_x^T$, com $\tilde{L}_x = 0$.

A seguir, veremos um exemplo de um problema de controle ótimo quântico de tempo. Para algumas classes de problemas, pode-se mostrar que certas propriedades simplificam o cálculo do controle ótimo de tempo. Consideramos, ainda, sistemas descritos pela Equação de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H}(u) |\psi\rangle$, expressa em forma mais próxima à linguagem corrente da Teoria de Sistemas Dinâmicos, como:

$$\frac{d}{dt}\vec{\psi} = -iH(u)\vec{\psi} \quad (5.4.4),$$

considerando-se, já, a mudança de escala na representação matricial do operador Hamiltoniano, relativa à constante \hbar .

Seja um Hamiltoniano H(u) da forma:

$$H(u_1, u_2, v_1, v_2) \equiv \begin{pmatrix} E_1 & u_1 + iu_2 & 0 \\ u_1 - iu_2 & E_2 & v_1 + iv_2 \\ 0 & v_1 - iv_2 & E_3 \end{pmatrix}$$
 (5.4.5).

em que, u_1 , u_2 , v_1 e v_2 são as funções de controle; E_1 , E_2 e E_3 representam os níveis de energia próprios do sistema quântico na ausência dos controles. Com efeito, na ausência dos mesmos, é direto observar que E_1 , E_2 e E_3 são os autovalores do observável quântico Energia, dado pelo operador Hamiltoniano (H_0 - Hamiltoniano do sistema não controlado). Essa classe de modelos descreve, de um ponto de vista fenomenológico, a dinâmica de certos sistemas de três níveis, acoplados com dois campos de lasers, correspondentes aos controles $u = (u_1 \quad u_2)^T$ e $v = (v_1 \quad v_2)^T$. O laser u (ou v) ativa o acoplamento entre os níveis 1 e 2 (ou 2 e 3). Um cálculo direto da Álgebra de Lie Dinâmica desse sistema mostra que é um operador controlável (D'ALESSANDRO, 2007).

Essa classe de modelos foi estudada por Boscain, Chambrion e Charlot (2005) e pode ser generalizada para um problema de *n* níveis, apresentando propriedades convenientes para o cálculo de controle ótimo de tempo.

É válida a seguinte:

Proposição (BOSCAIN; CHAMBRION; CHARLOT, 2005): Considere o problema de direcionar o estado $|\psi\rangle$ (ou $\vec{\psi}$) de $\frac{d}{dt}\vec{\psi}=-iH(u)\vec{\psi}$, de um estado inicial $\vec{\psi}_0$ para um estado final $\vec{\psi}_f$, em tempo mínimo, com os controles $u=(u_1\ u_2)^T$ e $v=(v_1\ v_2)^T$, tais que $\|u_1+iu_2\|\leq 1$ e $\|v_1+iv_2\|\leq 1$. Então, sempre existe controles que minimizam, em ressonância, da forma:

$$(u_1 + iu_2) \equiv u(t) \exp(i[(E_2 - E_1) \cdot t + \xi_1])$$
 (5.4.6);

$$(v_1 + iv_2) \equiv v(t) \exp(i[(E_3 - E_2) \cdot t + \xi_2])$$
 (5.4.7);

com funções reais u(t) e v(t); e parâmetros reais de fase ξ_1 e ξ_2 .

Consideremos o problema de direcionar o estado $\vec{\psi}$ a partir de um estado inicial da forma $\vec{\psi}_0 = \begin{bmatrix} e^{i\eta_1} & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$, correspondendo a um nível de energia E_1 (isto é, um autoestado $|E_1\rangle$), para um estado da forma $\vec{\psi}_f = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e^{i\eta_2} \end{bmatrix}^T$, correspondendo a um nível de energia E_3 (isto é, um auto-estado $|E_1\rangle$). Os parâmetros η_1 e η_2 são parâmetros reais arbitrários.

É conveniente efetuar uma mudança de coordenadas da forma:

$$\vec{r} = DU(t)\vec{\psi}$$
 (5.4.8);

com a matriz U(t) definida por: $U(t) \equiv diag(iE_1t \quad iE_2t \quad iE_3t)$; e, D, uma matriz apropriada com as propriedades, que goza das propriedades de ser unitária, constante e diagonal.

Com isto, transforma-se o sistema dado pela expressão (5.4.4), com Hamiltoniano da forma (5.4.5), no sistema:

$$\frac{d}{dt}\vec{r} = -S_z u(t)\vec{r} - S_x v(t)\vec{r}$$
 (5.4.9);

em que, S_x , S_y e S_z são definidas como:

$$S_{x} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.4.10a);

$$S_{y} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.4.10b);

$$S_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (5.4.10c).

As matrizes S_x , S_y e S_z são anti-simétricas e, ademais, constituem-se no conjunto *span* do grupo SO(3), ou seja, o grupo das matrizes ortogonais, 3×3 , com determinante igual a 1 (GILMORE, 1974), (HASSANI, 1999). Ademais, gozam das seguintes relações de comutação:

$$[S_x, S_y] = S_z$$
, $[S_y, S_z] = S_x$ e $[S_z, S_x] = S_y$ (5.4.11a,b,c).

Na derivação da expressão (5.4.9), foi utilizada a proposição anterior, e, em particular, restringimo-nos aos controles em ressonância das formas dadas por (5.4.6) e (5.4.7), com funções reais u(t) e v(t); e parâmetros fase ξ_1 e ξ_2 reais. Em particular, u(t) e v(t) são as amplitudes de controle (variantes no tempo), que aparecem na expressão do sistema (5.4.9).

A mudança de coordenadas não altera a estrutura dos estados inicial e final. Ademais, é possível escolhê-los como sendo vetores de números reais; e os fatores de fase, η_1 e η_2 , são parâmetros arbitrários. Em particular, pode-se assumir o estado inicial como $\vec{r}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$ e o estado final desejado como $\vec{r}_f = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^T$.

Valendo-se do resultado que versa sobre a existência de um controle minimizador em ressonância, o problema é, portanto, reduzido a um problema de controle ótimo de tempo, no corpo dos reais, sobre uma esfera bidimensional (D'ALESSANDRO, 2007).

O resultado final é sintetizado no seguinte teorema, que é provado no artigo de Boscain, Chambrion e Charlot (2005):

Teorema 5.4.2: O controle ótimo para direcionar o estado \vec{r} do sistema (5.4.9): $\frac{d}{dt}\vec{r} = -S_z u(t)\vec{r} - S_x v(t)\vec{r} \text{ , entre dois pontos, \'e uma concatenação de controles } (u,v) \text{ do tipo: } (u,v) = (\pm 1,\pm 1) \text{ e } (u,v) = (\pm 1,0). \text{ Em particular, o controle de tempo \'e timo, que transfere o sistema do estado inicial <math>\vec{r}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$ para o estado final $\vec{r}_f = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^T$, \'e dado por u = 1 e v = 1 no intervalo $[0,\pi/\sqrt{2}]$.

Veremos, a seguir, como o Princípio do Máximo de Pontryagin determina a natureza dos controles ótimos. Em particular, os argumentos que se seguem provam a

primeira sentença do teorema. Para a prova completa, referimo-nos ao supracitado artigo.

O Hamiltoniano de Controle Ótimo (Teorema 5.4.1), $h(\lambda, \vec{r}, u, v)$, escreve-se, neste caso particular, como:

$$h(\lambda, \vec{r}, u, v) = -u\lambda^T S_z \vec{r} - v\lambda^T S_x \vec{r}$$
 (5.4.12),

o qual é, conforme já discutimos, constante ao longo da trajetória ótima. As equações adjuntas para o co-estado λ escrevem-se como se segue:

$$\dot{\lambda} = -uS_{z}\lambda - vS_{x}\lambda \qquad (5.4.13).$$

O procedimento de encontrar o controle de tempo ótimo consiste em calcular todos os controles que satisfazem o PMP, isto é, os extremantes, e, então, selecionar aquele que dá o tempo mínimo. Para entender a natureza dos extremantes, deve-se notar que aqueles identicamente nulos, isto é, $u \equiv 0$ e $v \equiv 0$, em um intervalo de medida não nula, devem ser excluídas porque os mesmos são, obviamente, não ótimos (com relação ao tempo). Com efeito, a trajetória "pararia" em algum ponto por algum tempo.

A partir do Princípio do Máximo de Pontryagin, obtemos que, em intervalos nos quais $\lambda^T S_z \vec{r} < 0 \ (>0)$, $u \equiv 1 \ (u \equiv -1)$, respectivamente, enquanto que, em intervalos nos quais $\lambda^T S_z \vec{r} < 0 \ (>0)$, $v \equiv 1 \ e \ v \equiv -1$. Ademais, não se pode ter intervalos em que $\lambda^T S_z \vec{r} = 0$ e $\lambda^T S_z \vec{r} = 0$, pois, neste caso, ao diferenciarmos com relação ao tempo essas duas expressões, e usando as equações dinâmicas (5.4.9) e (5.4.13), e o fato que os extremantes com $u \equiv 0$ e $v \equiv 0$ foram excluídos, obtém-se $\lambda^T S_z \vec{r} = 0$. Isto, juntamente com $\lambda^T S_z \vec{r} = 0$ e $\lambda^T S_z \vec{r} = 0$, resultaria em $\lambda \equiv 0$, o que contradiz o PMP.

Se $\lambda^T S_z \vec{r} = 0$ é verificado em algum intervalo, se diferenciarmos esta expressão, tendo em vista as equações dinâmicas (5.4.9): $\frac{d}{dt}\vec{r} = -S_z u(t)\vec{r} - S_x v(t)\vec{r}$ e (5.4.13): $\dot{\lambda} = -uS_z\lambda - vS_x\lambda$, obtém-se: $v\lambda^T S_y\vec{r} = 0$, e, desde que $\lambda^T S_x\vec{r} = 0$ não pode ser verificado no mesmo intervalo, conforme mostrado acima, deve-se ter $v \neq 0$, o que implica em $\lambda^T S_y\vec{r} = 0$. Diferenciando-se esta expressão no tempo, e, levando-se em conta (5.4.9), obtém-se: $-\lambda^T S_x\vec{r}u + \lambda^T S_z\vec{r}v = 0$, a qual, com $\lambda^T S_z\vec{r} = 0$, e, desde que $\lambda^T S_x\vec{r} \neq 0$, resulta em $u \equiv 0$. Analogamente, prova-se que, quando $\lambda^T S_x\vec{r} = 0$ é verificado, $v \equiv 0$.

As propriedades da Proposição (BOSCAIN; CHAMBRION; CHARLOT, 2005) são válidas para sistemas e custos mais gerais. Em particular, a existência de um minimizador em ressonância é uma propriedade mais geral. Com efeito, ela também é válida para o problema do controle ótimo de um sistema quântico de dois níveis. Assim, remete-se, novamente, o leitor interessado ao artigo de Boscain, Chambrion e Charlot (2005) e às referências lá citadas.

Por fim, conforme discutido na Seção 5.2, sempre é possível considerar um problema quântico, naturalmente definido no corpo dos números complexos, como um problema real, valendo-se dos expedientes vistos. Entretanto, neste caso, tem-se a redução da dimensão do problema, o que é crucial na obtenção de sua solução analítica.

5.5 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA CONTROLE ÓTIMO DE SISTEMAS QUÂNTICOS

5.5.1 Introdução

Há uma grande gama de métodos numéricos para resolver problemas de Controle Ótimo. Conforme já ressaltado nas primeiras Seções deste Capítulo, a obtenção de soluções analíticas para problemas de Controle Ótimo, sejam elas para problemas que envolvem dinâmicas quânticas, sejam elas para dinâmicas ditas clássicas, consiste em um problema assaz difícil; e, com efeito, factível apenas para certos problemas particulares, os quais são intrinsecamente simples, exibem certas simetrias e possibilidades de simplificações, e, de modo geral, sejam de baixa dimensionalidade. Aí reside a grande relevância dos métodos numéricos e algoritmos computacionais para a solução de problemas de Controle Ótimo, clássicos ou quânticos.

Alguns desses métodos visam encontrar de forma direta o controle ótimo em um problema específico. Outros são úteis na solução de problemas auxiliares, como, por exemplo, a integração das equações adjuntas do Princípio do Máximo de Pontryagin.

Sumarizam-se, a seguir, algumas das principais idéias com ênfase na aplicação em sistemas quânticos. Em linhas gerais, tais métodos podem ser divididos em duas classes principais, a saber, aqueles que utilizam um processo de *discretização* para encontrar o controle ótimo, e os *algoritmos iterativos*.

Esta última abordagem gera uma seqüência de funções de controle convergindo para o controle ótimo, ou para um candidato a controle ótimo. Neste contexto, por exemplo, pode-se citar a solução numérica de problemas de valores de contorno para um ou dois pontos (valor final ou valores inicial e final), através da aplicação do Princípio do Máximo de Pontryagin (D'ALESSANDRO, 2007).

Devemos ter em mente, por fim, que, para sistemas de controle ótimo quântico, procedimentos que visam encontrar de forma analítica condições de optimalidade, seja por métodos variacionais, ou pelo PMP, para fins de obtenção ou síntese do controle ótimo, são possíveis de serem aplicados apenas para "toy models" e/ou modelos simples, necessariamente ambos de pequena dimensão. Com efeito, para cálculos práticos de um vetor de estado $|\psi\rangle$, que habita um certo Espaço de Hilbert H, freqüentemente valem-se de aproximações no sentido de substituir tal estado $|\psi\rangle$ por

um estado, digamos, $|\psi'\rangle$, pertencente a um Espaço Euclideano E^n . A dimensão n adequada para o vetor $|\psi'\rangle$ é, no entanto, muito grande: da ordem de 10^4 - 10^6 para uma molécula com 6 ou 7 graus de liberdade, por exemplo. Assim, para um tal sistema, essa característica, por si só, já obriga que se escolha de forma criteriosa o algoritmo numérico a ser empregado. Métodos iterativos de refinamento progressivo da lei de controle u(t) têm se mostrado como instrumentos efetivos para a solução de tais problemas de Controle Ótimo no contexto quântico (KROTOV, 2009).

5.5.2 Métodos que usam Discretização

Dada a transformação de um sistema quântico em um sistema dinâmico evoluindo sobre (o corpo dos números reais) no conjunto dos números reais \Re :

$$\dot{x} = \tilde{H}(u)x$$
 (5.5.2.1),

e um funcional de custo do tipo Bolza:

$$J(u) = \phi(x(T)) + \int_{0}^{T} L(x(t), u(t)) dt$$
 (5.5.2.2),

pode-se escolher um passo de tempo Δt e um inteiro positivo N, tal que N. $\Delta t = T$. O intervalo Δt tem que ser escolhido pequeno se a dinâmica relevante de (5.2.2.1) é rápida.

Definindo-se $x_k \equiv x(k\Delta t)$, com $u_k \equiv u(k\Delta t)$, com k = 0, 1, ..., N, pode-se escrever:

$$x_{k+1} \approx x_k + (\Delta t)\tilde{H}(u_k)x_k$$
 (5.5.2.3), e

$$J(u) \approx \phi(x_N) + \sum_{k=0}^{N-1} L(x_k, u_k) \Delta t$$
 (5.5.2.4).

Se n é a dimensão do vetor de estado x, e m a dimensão do vetor de controle u, há, então, Nn + Nm variáveis: $x_1, ..., x_N$ e $u_0, ..., u_{N-1}$ em (5.5.2.3) e (5.5.2.4).

Deseja-se encontrar os valores que minimizam a função no lado direito da expressão (5.5.2.4), sujeita à restrição em (5.5.2.3). Esta restrição pode ser eliminada, e o problema transformado em um problema de otimização sem restrição ao se definir:

$$G(u_k) \equiv I + (\Delta t)\widetilde{H}(u_k) \quad (5.5.2.5),$$

e, ao ajustando-a a partir de (5.5.2.3), de modo a obter a seguinte expressão para x_k :

$$x_k = G(u_{k-1})G(u_{k-2})...G(u_1)G(u_0)x_0$$
 (5.5.2.6).

Ao colocar x_k , acima definindo, em (5.5.2.4), obtemos apenas uma função apenas dos $u_0, ..., u_{N-1}$ a ser minimizada.

Métodos numéricos padrão de otimização sem restrição(ões), tal como o método "Steepest Descent Method", descrito em, por exemplo, (DANIELS, 1978), pode ser usado para este problema.

5.5.3 Métodos Iterativos

Métodos iterativos para Controle Ótimo geram seqüências de leis de controle que convergem para extremantes que satisfazem as condições necessárias de optimalidade (ou seja, o Princípio do Máximo de Pontryagin).

Muitas propostas para tais algoritmos têm sido apresentadas; bem como estudos, tanto teóricos, quanto numéricos, versando sobre as propriedades de convergência e a eficiência de tais algoritmos, existem na literatura especializada. Algumas referências que podemos citar incluem, por exemplo, (ZHU; RABITZ, 1998), (GRIVOPOULOS; BAMIEH, 2002), (MADAY; TURICINI, 2003), (ZHU; RABITZ, 2003), (CASTRO; GROSS, 2009) e (DE FOUQUIERES, 2012). Com relação a este último trabalho, em específico, que tem em vista a aplicação a portas quânticas ("quantum gates") (NIELSEN; CHUANG, 2000), (BOUWMEESTER; EKERT; ZEILINGER, 2000), bem como ao controle ótimo de uma dinâmica quântica unitária genérica, pode-se dizer que se trata de uma abordagem promissora, pois, segundo o autor, o novo algoritmo desenvolvido é até três vezes mais rápido que os algoritmos "estado da arte" existentes, e que o mesmo aumenta as capacidades de controle de sistemas quânticos com seus tempos de coerência (DE FOUQUIERES, 2012).

Consideremos o caso em que o funcional de custo é dado por (vide Seção 5.2):

$$J(u) = \frac{1}{2} \langle O \rangle_{\psi} + \frac{k}{2} \int_{0}^{T} u^{2}(t) dt = \frac{1}{2} \langle \psi | O | \psi \rangle + \frac{k}{2} \int_{0}^{T} u^{2}(t) dt =$$
$$= \frac{1}{2} \vec{\psi}^{*} O \vec{\psi} + \frac{k}{2} \int_{0}^{T} u^{2}(t) dt \qquad (5.5.3.1);$$

com k > 0, e, em que, O é uma matriz hermiteana e negativa definida (podendo, ou não, necessariamente, representar um operador ou observável quântico). A título de exemplo, podemos escolher O como sendo: $O \equiv -\vec{\psi}_f^* \vec{\psi}_f$, se $\vec{\psi}_f$ é o estado final, ou estado-alvo desejado, de modo que esta parcela do funcional de custo dá conta da minimização da distância com relação ao estado final desejado ("Problema de Mayer").

Conforme já visto ao início deste capítulo, trata-se de um funcional de custo típico (do tipo "Bolza"), comumente encontrado em situações de controle molecular, nas

quais o controle disponível e/ou empregado consiste em apenas um campo eletromagnético implementado por um feixe de laser.

Tal dinâmica poderia ser escrita como (D'ALESSANDRO, 2007):

$$\frac{d}{dt}\vec{\psi} = (A + uB)\vec{\psi} \qquad (5.5.3.2);$$

em que, $\vec{\psi}$ é o estado puro; u, o campo de controle; e A e B são matrizes pertencentes ao Grupo de Lie SU(n), ou seja, o grupo das matrizes unitárias, quadradas, de dimensão $n \times n$, com determinante igual a 1.

Transformando o problema dado em um problema envolvendo variáveis reais, conforme o que fora também visto na primeira seção do presente Capítulo, o funcional de custo toma a forma:

$$J(u) = \frac{1}{2}x^{T}\tilde{O}x + \frac{k}{2}\int_{0}^{T}u^{2}(t)dt$$
 (5.5.3.3);

em que, o vetor x e a matriz \tilde{O} são definidos como:

$$x = \begin{bmatrix} \vec{\psi}_R^T & \vec{\psi}_I^T \end{bmatrix}^T \qquad (5.5.3.4);$$

$$\widetilde{O} \equiv \begin{bmatrix} O_R & -O_I \\ O_I & O_R \end{bmatrix}$$
 (5.5.3.5);

sendo $\tilde{\cal O}$ uma matriz simétrica e negativa definida, para qual valem as relações seguintes:

$$O = O_R + iO_I$$
 (5.5.3.6a);

$$O_R = O_R^T$$
 (5.5.3.6b);

$$O_I^T = -O_I$$
 (5.5.3.6c).

Destarte, a dinâmica do sistema transformado toma, então, a forma do sistema linear:

$$\dot{x} = \widetilde{A}x + \widetilde{B}xu \qquad (5.5.3.7);$$

com $x(0)=x_0$, uma condição inicial apropriada; sendo as matrizes \widetilde{A} e \widetilde{B} dadas por $\widetilde{A}=\begin{bmatrix}A_R & -A_I\\A_I & A_R\end{bmatrix}$ e $\widetilde{B}=\begin{bmatrix}B_R & -B_I\\B_I & B_R\end{bmatrix}$, respectivamente; e, válidas as relações: $A=A_R+iA_I$ e $B=B_R+iB_I$.

As condições necessárias de otimalidade, anteriormente vistas, conduzem, neste caso, à existência de um vetor λ (co-estado) não nulo, o qual satisfaz:

$$\dot{\lambda} = \widetilde{A}\lambda + \widetilde{B}\lambda u \qquad (5.5.3.8);$$

com condição temporal de término $\lambda(T)=-\widetilde{O}x(T)$, de sorte que, dados x=x(t) e $\lambda=\lambda(t)$, resulta a desigualdade:

$$\lambda^{T}(\widetilde{A}x + \widetilde{B}xu) - \frac{k}{2}u^{2} \ge \lambda^{T}(\widetilde{A}x + \widetilde{B}xv) - \frac{k}{2}v^{2}$$
 (5.5.3.9),

para todo valor admissível v (D'ALESSANDRO, 2007).

Se não assumirmos nenhum limite no valor do esforço de controle u, podemos calcular seu máximo tomando a derivada do lado direito da desigualdade com relação a v, e impondo-a igual a zero. Disto resulta:

$$u(t) = \frac{1}{k} \lambda^{T}(t) \widetilde{B} x(t)$$
 (5.5.3.10).

Em geral, métodos iterativos geram seqüências de funções $\{u^k(t), x^k(t), \lambda^k(t)\}$, as quais convergem para uma tripla das funções vetoriais - $u(t), x(t), \lambda(t)$ - que satisfazem as equações do Princípio do Máximo de Pontryagin: $\dot{x} = \tilde{A}x + \tilde{B}xu$, com a condição inicial $x(0) = x_0$, e $\dot{\lambda} = \tilde{A}\lambda + \tilde{B}\lambda u$, com $\lambda(T) = -\tilde{O}x(T)$.

O mais simples e natural método iterativo é como se segue. Começando com um controle $u^0=u(t)$, integra-se no tempo o sistema de equações diferenciais ordinárias $\dot{x}=\widetilde{A}x+\widetilde{B}xu$, a fim de obter $x^1=x^1(t)$. Então, usando x^1 ao invés de x na expressão da condição de término $\lambda(T)=-\widetilde{O}x(T)$, integra-se, a seguir, de forma retroativa, para se obter $\lambda^1=\lambda^1(t)$. Em seguida, os vetores x^1 (estado) e λ^1 (co-estado) são utilizados na expressão (5.5.3.10) - $u(t)=\frac{1}{k}\lambda^T(t)\widetilde{B}x(t)$ - para calcular a estimativa de controle $u^1=\frac{1}{k}\lambda^{1T}\widetilde{B}x^1$. Este processo é, então, iterado.

Desafortunadamente, tal procedimento iterativo simples e intuitivo não converge em muitas situações. Isso tem estimulado muita pesquisa com o intuito de desenvolver algoritmos iterativos, para os quais se consiga garantias de convergência.

O algoritmo apresentado por Maday e Turinici (2003) contém, como casos especiais, o algoritmo de Krotov (KROTOV, 1995) e, sua modificação, o algoritmo de Zhu-Rabitz (ZHU; RABITZ, 1998). O algoritmo de Krotov é amplamente utilizado em problemas de Controle Ótimo Quântico, tendo apresentado excelentes resultados em vários aplicações propostas na literatura. Com efeito, estudaremos de forma analítica a eficiência deste algoritmo aplicado ao sistema de Landau-Zener em (CANEVA *et al.*, 2009), no próximo capítulo da presente Tese. O algoritmo de Krotov é descrito na referência original (KROTOV, 1995), em um outro trabalho do mesmo autor, (KROTOV,

2009), no qual idéias de Controle Ótimo e sua aplicação a sistemas quânticos são igualmente discutidas, e, também em (SCHIRMER; de FOUQUIERES, 2011), em que os autores tratam o assunto em considerável detalhe.

Descreveremos, a seguir, o algoritmo proposto por Maday e Turinici (2003) a título de exemplo de um algoritmo iterativo para Controle Ótimo Quântico. O processo iterativo é como se segue.

i) Escolha duas constantes $\delta, \eta \in [0,2]$. Temos então as equações:

$$\dot{x}^k = \widetilde{A}x^k + \widetilde{B}x^k u^k, \text{ com } x^k(0) = x_0$$
 (i.1);

$$u^{k} = (1 - \delta)v^{(k-1)} + \frac{\delta}{k}\lambda^{(k-1)T}\widetilde{B}x^{k}$$
 (i.2);

$$\dot{\lambda}^{k} = \left(\widetilde{A} + \widetilde{B} v^{k}\right) \lambda^{k}, \text{ com } \lambda^{k}(T) = -\widetilde{O} x^{k}(T) \quad \text{(i.3)};$$

$$v^{k} = (1 - \eta)u^{k} + \frac{\eta}{k} \left(\lambda^{(k)T} \widetilde{B} x^{k} \right)$$
 (i.4);

- ii) Começa-se com um "chute" para um valor inicial ν^0 do controle auxiliar ν , e também um para valor inicial λ^0 do co-estado λ ;
- iii) Usando (i.2) em (i.1), e integrando para frente a equação não-linear resultante, obtém-se x^1 ;

- iv) A seguir, o valor de x^1 é aplicado em (i.2), fornecendo u^1 ;
- v) Agora, u^1 e x^1 são aplicados em (i.4);
- vi) De posse do valor de v^1 , integra-se retroativamente a expressão (i.3);
- vii) Com o valor de λ^1 produzido no passo anterior, e valendo-se de (i.4), chega-se a ν^1 ;
- viii) Por fim, λ^1 e ν^1 , produzidos nos passos vi) e vii), respectivamente, substituem os valores de λ^0 e ν^0 , estabelecendo-se, com isso, o processo iterativo.

Tal algoritmo iterativo tem a seguinte propriedade de convergência, que é enunciada no seguinte:

Teorema (MADAY; TURINICI, 2003): O algoritmo prescrito é tal que $J(u^{k+1}) \leq J(u^k)$. Em particular, desde que o funcional J(u) seja limitado, isto é, $\sup \lVert J(u) \rVert < \infty$, a sequência $J(u^k)$ convergirá.

Deve-se notar, entretanto, que, em princípio, não há garantia de que as seqüências de leis de controle irão convergir para um *mínimo global*. Empiricamente, no entanto, tem sido aferido que o resultado obtido a partir de um algoritmo numérico de Controle Ótimo é, em muitos casos, de fato, o controle ótimo real (RABITZ; HSIEH; ROSENTHAL, 2004).

6 QUANTIFICANDO O DESEMPENHO DE SISTEMAS DE CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO TEMPORAL: TEMPOS MÍNIMOS DE TRANSIÇÕES DE ESTADOS E FATORES DE MÉRITO ASSOCIADOS NO CASO DE HAMILTONIANOS INDEPENDENTES DO TEMPO

6.1 INTRODUÇÃO

Um dos problemas de Controle Ótimo mais importantes é aquele relacionado com a transferência do estado do sistema para um certo estado-alvo desejado em um tempo mínimo. No contexto quântico, tal problema é de crucial importância. Com efeito, uma das maiores dificuldades de natureza operacional em sistemas quânticos reside no fato de que os mesmos são muito sensíveis à presença do ambiente exterior, o qual freqüentemente destrói as principais características quânticas, que são fundamentais, por exemplo, para a implementação de sistemas de processamento de Informação Quântica, bem como para a viabilidade da Computação Quântica. Trata-se do problema de Decoerência Quântica. Destarte, é amplamente desejável que os expedientes e métodos de Controle Otimo de Minimização de Tempo, aplicados a Sistemas Quânticos, sejam eles de natureza analítica, ou de natureza algorítmica e computacional, mostrem-se os mais eficientes possíveis nesse sentido. No entanto, há limitações físicas, inerentes à Dinâmica Quântica, que dizem respeito ao menor tempo, fisicamente possível, para que uma transição de estados quânticos ocorra. Tal questão está intimamente ligada às Relações de Incerteza de Tempo-Energia da Mecânica Quântica. Procuramos, portanto, no presente Capítulo, deduzir de forma rigorosa tais relações e levar a cabo análises minuciosas, inicialmente de cunho teórico geral, sobre os menores tempos fisicamente possíveis para transições quânticas de estado, para depois estendê-las para casos particulares de transferências. Tais estudos nos dão o ensejo necessário para a introdução de uma medida formal e quantitativa para avaliar o desempenho de Sistemas de Controle Ótimo Quântico de Tempo Mínimo, a saber, Fatores de Mérito Temporais, os quais são definidos, neste Capítulo, de forma teórica e geral, para posteriores particularizações, de acordo com a natureza das transferências de estado pretendidas e/ou dos sistemas quânticos de interesse.

6.2 TEMPOS MÍNIMOS PARA TRANSIÇÕES DE ESTADOS QUÂNTICOS

Antes de abordar o problema de Controle Ótimo em Sistemas Quânticos em Tempo Mínimo, ou seja, efetuar uma dada transferência de estados - de um estado inicial prescrito para um dado estado-alvo desejado - no menor tempo possível, deve-se levar em consideração uma questão básica de natureza física, a qual pode ser colocada nos seguintes termos. Dado um estado inicial $|\psi_I\rangle$ que evolui no tempo de acordo com a Representação de Schrödinger da Dinâmica Quântica, isto é, mediante a atuação do Operador de Evolução Temporal dependente do Hamiltoniano do Sistema, o quão rápido, fisicamente falando, pode-se dar a transição para o estado final - $|\psi_F\rangle$? Em outras palavras, qual é o menor tempo possível para que uma transição de estados quânticos ocorra?

Este problema de natureza teórica tem sido amplamente estudado e está intimamente ligado a caracterizações dinâmicas oriundas das Relações de Incerteza Tempo-Energia. Tais relações diferem fundamentalmente das Relações de Incerteza de Heisenberg (por exemplo, da incerteza simultânea na medição da posição e do momento linear de uma partícula quântica), que advém, em geral, da *Incompatibilidade*, a qual matematicamente se traduz, dentro do arcabouço teórico da Mecânica Quântica, na *não Comutabilidade* dos Observáveis Quânticos envolvidos no processo de medida. Com efeito, as relações de Incerteza Tempo-Energia encontram suas raízes na Dinâmica Quântica como se pretende mostrar a seguir.

De um ponto de vista histórico, desde a chamada "Velha Teoria Quântica", que teve como pioneiros Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr, entre outros, compreendendo as duas primeiras décadas do século passado, firmemente

estabelecida estava, já, a equação de Planck-Einstein, relacionando a energia e a freqüência de um fóton, através da constante fundamental de Planck *h*:

$$E = h \nu$$
 (6.2.1).

Como se sabe, tal relação foi fundamental não apenas na hipótese pioneira de Planck da quantização da emissão de radiação de um corpo negro, em 1900, mas também na explicação dada por Einstein para o efeito fotoelétrico em 1905, bem como para o modelo atômico de Bohr, que explicava a estabilidade do átomo de hidrogênio a partir da quantização de níveis de energia, postulando órbitas estáveis para o elétron, de modo que, ao saltar para um nível (ou órbita) mais ou menos energético, o elétron absorvia ou emitia um quantum de energia, respectivamente, obedecendo a relação (6.2.1), correspondendo a um fóton com freqüência ν .

Assim, dada uma variação trivial de freqüência, em um dado intervalo de tempo, do tipo:

$$\Delta v . \Delta T \sim 1$$
 (6.2.2),

dando a mesma conta de uma "incerteza" $\Delta \nu$ na medida da freqüência de uma radiação monocromática, no intervalo de tempo ΔT , somos conduzidos, valendo-se da expressão (6.2.1) a:

$$\Delta E.\Delta T \sim h$$
 (6.2.3).

Tal dedução desta "relação de incerteza" é eminentemente heurística, ainda que goze de respaldo experimental dentro das condições físicas que evocamos para obtêla. Ademais, se procurarmos generalizá-la como sendo algo da forma:

$$\Delta H.\Delta T \sim h$$
 (6.2.4),

uma vez que o Hamiltoniano corresponde à energia de um sistema mecânico (clássico ou quântico), incorreremos em sérias dificuldades. Se *H* corresponde a um observável quântico no sentido corrente da Mecânica Quântica, tal como foi primeira e solidamente estabelecido por Paul Dirac já na primeira edição de seu célebre tratado (DIRAC, 1958)²⁹, não se pode mais identificar a energia com a freqüência da radiação monocromática vezes a constante de Planck. Ademais, (6.2.4) torna-se intrinsecamente inválida e desprovida de sentido para qualquer sistema quântico tratado de forma matematicamente adequada.

A primeira tentativa de uma formulação teoricamente satisfatória de uma Relação de Incerteza Tempo-Energia foi levada a cabo pelos físicos soviéticos Leonid Mandelstam e Igor Tamm em 1945 (MANDELSTAM; TAMM, 1945).

Procuremos, a seguir, usando notação moderna, apresentar o ponto de partida teórico por eles tomado, chegando-se, por fim, na Relação de Incerteza Tempo-Energia desejada, através de deduções e análises rigorosas e minuciosas. É também nosso propósito modificá-la, de modo a introduzir variantes da mesma, que sejam adequadas para nossos fins, conforme ficará claro mais adiante.

Sejam \widehat{R} e \widehat{S} dois operadores hermiteanos genéricos (observáveis quânticos). As seguintes relações são válidas (MANDELSTAM; TAMM, 1945):

$$\Delta \widehat{S}.\Delta \widehat{R} \ge \frac{1}{2} \left| \left\langle \widehat{R}\widehat{S} - \widehat{S}\widehat{R} \right\rangle \right|$$
 (6.2.5);

$$\frac{d\langle \hat{R} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \left[\hat{R}, \hat{H} \right] \rangle \qquad (6.2.6);$$

_

²⁹ A primeira edição de "The Principles of Quantum Mechanics" data de 1930, sendo a quarta e última datada de 1958.

em que, $\Delta \widehat{S}$ e $\Delta \widehat{R}$ são as raízes quadradas dos desvios quadráticos médios dos operadores \widehat{R} e \widehat{S} , respectivamente (conforme já visto, também chamados de "operador de dispersão" ou, simplesmente, de desvio padrão); e, (6.2.6), nada mais é que a equação da evolução dinâmica de \widehat{R} , na Representação de Heisenberg, para o valor médio ou esperado deste observável. Se impusermos $\widehat{S} \equiv \widehat{H}$ em (6.2.5), e aplicarmos em (6.2.6), ficamos com a desigualdade:

$$\Delta \hat{H}.\Delta \hat{R} \ge \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle \hat{R} \rangle}{dt} \right|$$
 (6.2.7).

Essa relação fornece, pois, a conexão entre o desvio padrão $\Delta \hat{H}$ da energia total, ou incerteza na determinação da energia, de um sistema isolado e o desvio padrão $\Delta \hat{R}$ (incerteza) de alguma outra quantidade dinâmica, relacionando-os à taxa de variação do valor médio desta mesma quantidade.

A relação (6.2.7) pode ser expressa de outra forma. Dado que o módulo de uma integral é menor ou igual à integral do módulo do integrando (RUDIN, 1976), (BUCK, 1978), efetuando-se uma integração de (6.2.7) de t a t + Δt , e levando-se em conta que $\Delta \hat{H}$ é constante, obtém-se:

$$\Delta \hat{H}.\Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \frac{\left|\left\langle \hat{R}_{t+\Delta t} \right\rangle - \left\langle \hat{R}_{t} \right\rangle\right|}{\left\langle \Delta \hat{R} \right\rangle}$$
 (6.2.8),

em que o denominador do lado direito da desigualdade denota o valor médio de $\Delta \hat{R}$ durante o tempo Δt .

É conveniente introduzir, neste ponto, uma notação especial - ΔT - para o tempo mais breve, durante o qual o valor médio de uma certa grandeza física é modificado em uma quantidade igual ao desvio padrão da mesma. Assim, ΔT pode ser chamado de

desvio padrão (incerteza) de tempo, e valendo-se desta notação, podemos reescrever (6.2.8) da seguinte forma:

$$\Delta \hat{H}.\Delta T \geq \frac{\hbar}{2}$$
 (6.2.9).

Consideremos agora um operador de projeção $\hat{\Lambda} \equiv |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$. É imediato observar que apenas um de seus autovalores é unitário (quando aplicado ao autoestado $|\psi_0\rangle$) e todos os demais são nulos. Assim, temos que:

$$\hat{\Lambda}^2 = \hat{\Lambda}\hat{\Lambda} = \hat{\Lambda} \quad (6.2.10).$$

De fato, Λ é um operador idempotente, como facilmente pode se verificar.

Ademais, o valor médio $\langle \hat{\Lambda} \rangle$ pode ser interpretado como sendo a probabilidade de se encontrar o sistema em um dado estado quântico $|\psi\rangle$, uma vez que, a partir da definição de valor médio, temos: $\langle \hat{\Lambda} \rangle_{\psi} \equiv \langle \psi | \hat{\Lambda} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | \psi \rangle = |\langle \psi | \psi_0 \rangle|^2 = P_{\psi}$. Evidentemente, $0 \leq \langle \hat{\Lambda} \rangle \leq 1$. De acordo com (6.2.10),

$$\Delta \hat{\Lambda} = \sqrt{\left\langle \hat{\Lambda}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{\Lambda} \right\rangle^2} = \sqrt{\left\langle \hat{\Lambda} \right\rangle - \left\langle \hat{\Lambda} \right\rangle^2} \qquad \text{(6.2.11)}.$$

Assim, valendo-se da expressão (6.2.7) e (6.2.11), e nela aplicando o operador $\hat{\Lambda}$ no lugar de \hat{R} , ficamos com:

$$\Delta \hat{H} \cdot \sqrt{\langle \hat{\Lambda} \rangle - \langle \hat{\Lambda} \rangle^2} \ge \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle \hat{\Lambda} \rangle}{dt} \right|$$
 (6.2.12).

Essa desigualdade contém apenas uma quantidade variável no tempo: $\hat{\Lambda} = \hat{\Lambda}(t)$ e sua derivada temporal, e pode ser integrada com respeito ao tempo. Se, por exemplo, $\hat{\Lambda}(t) = \hat{\Lambda}(0) = 1$, ou seja, se no instante de tempo t = 0, tínhamos certeza de que o sistema se encontrava no estado inicial $|\psi_0\rangle$, então, segue de (6.2.12) que, para $t \geq 0$:

$$\frac{\pi}{2} - \arcsin\sqrt{\langle \hat{\Lambda}(t) \rangle} \le \frac{\Delta \hat{H}.t}{\hbar}$$
 (6.2.13).

A partir de (6.2.13), através de propriedades trigonométricas básicas e manipulações simples, somos conduzidos à expressão:

$$\langle \hat{\Lambda}(t) \rangle \ge \cos^2 \left(\frac{\Delta \hat{H}.t}{\hbar} \right)$$
 (6.2.14);

para $t \ge 0$.

Notemos, aqui, um fato importante. Primeiramente, não obstante termos definido o operador de projeção Λ como sendo $\hat{\Lambda} \equiv |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$, com o produto externo dado pelo ket e pelo bra correspondentes a um estado ψ_0 , poderíamos também tê-lo definido, de forma mais geral, como sendo $\hat{\Lambda} \equiv |\psi_t\rangle\langle\psi_t|$, ou seja, para um estado quântico ψ_t evoluído no tempo, para um instante de tempo t qualquer, de modo a propriedade de idempotência do referido operador (6.2.10), bem como todas as expressões, argumentações e deduções anteriores permanecem válidas e gozam da devida generalidade.

A partir de (6.2.14), deduziremos duas expressões relevantes aos nossos propósitos. Dado que, conforme vimos, o valor médio do operador Λ corresponde à probabilidade de observarmos o sistema em um dado estado quântico $|\psi\rangle$, ou ainda,

de forma mais geral, em um certo estado $|\psi_{\tau}\rangle$ a evoluir no tempo, tendo estado o sistema (ou sido preparado) em um estado inicial $|\psi_{0}\rangle$, reescreveremos, assim, a desigualdade (6.2.14) como:

$$P_t \ge \cos^2\left(\frac{\Delta \hat{H}.t}{\hbar}\right)$$
 (6.2.15),

em que $P_{\scriptscriptstyle t} = \left| \left< \psi_{\scriptscriptstyle t} \left| \psi_{\scriptscriptstyle 0} \right> \right|^2$ é a probabilidade de encontrar o sistema em $\left| \psi_{\scriptscriptstyle t} \right>$ a partir de $\left| \psi_{\scriptscriptstyle 0} \right>$; com efeito, $\left< \hat{\Lambda}(t) \right> = \left< \psi_{\scriptscriptstyle 0} \left| \hat{\Lambda}(t) \right| \psi_{\scriptscriptstyle 0} \right> = \left< \psi_{\scriptscriptstyle 0} \left| \psi_{\scriptscriptstyle t} \right> \left< \psi_{\scriptscriptstyle t} \left| \psi_{\scriptscriptstyle 0} \right> \right|^2 = P_{\scriptscriptstyle t}$.

A partir de (6.2.15), deduzimos, por fim, que o menor tempo fisicamente possível, ou, de forma mais geral, que o limite temporal inferior 30 , fisicamente necessário para se efetuar uma transição de estados quânticos, sob a hipótese de um Hamiltoniano independente do tempo, é dado pela seguinte desigualdade, a qual leva em conta a incerteza na determinação da energia (dispersão ou desvio padrão de \hat{H}):

$$t \ge \frac{\hbar}{\Lambda \hat{H}} \arccos \sqrt{P_t}$$
 (6.2.16).

Em que t é o tempo necessário para uma transição de estados, cuja probabilidade associada é $P_{t}=\left|\left\langle \psi_{t}\left|\psi_{0}\right\rangle \right|^{2}.$

Tendo em vista (6.2.16), constata-se imediatamente que o tempo t é sempre um número real, haja vista que $|\langle \psi_t | \psi_0 \rangle|$ é um número real, a despeito do produto interno ("bracket") dos estados ser, em geral, um número complexo; da mesma forma, $\Delta \hat{H}$, como qualquer observável quântico, resulta sempre em um número real. Ademais, uma

_

³⁰ Matematicamente falando, diz-se tratar do *inf* ou *GLB* (g*reatest lower bound*) do subconjunto S dos tempos fisicamente possíveis para transições de estados quânticos.

vez que $P_t = \left| \left\langle \psi_t \left| \psi_0 \right\rangle \right|^2 \in [0,1]$, garantidas as condições de normalização dos estados, o que, em outras palavras, garante que as probabilidades obtidas variem sempre no intervalo real [0,1], resultará que o *range* da função *arccos*, para este domínio específico, e, por conseguinte, os valores de t, serão sempre positivos.

Um breve comentário faz-se oportuno aqui. Na literatura de Controle Quântico, a desigualdade (6.2.16) é conhecida como "limite de Bhattacharyya", em função de um artigo devido ao físico indiano Kamal Bhattacharyya, no qual o autor faz uma releitura da Relação de Incerteza Tempo-Energia de Mandelstam-Tamm, tendo em vista problemas de decaimento e/ou não-decaimento em sistemas quânticos (BHATTACHARYYA, 1983).

A desigualdade (6.2.16) dá-nos ensejo para a definição de nosso primeiro **Fator de Mérito**, para avaliação do desempenho do Controle Quântico Ótimo de Transição de Estados em Tempo Mínimo:

$$\eta_t \equiv \frac{t_{\min}}{t_{COS}} \qquad (6.2.17);$$

em que, t_{min} é o menor tempo fisicamente possível para que obtenhamos uma transição de estados quânticos desejada; e, t_{CQS} é o tempo, no qual conseguimos, efetivamente, realizar tal transição no Sistema Quântico Controlado (*Controlled Quantum System*) por meio de Controle Ótimo de Minimização de Tempo.

Em geral, como vimos no Capítulo anterior, são raras as soluções analíticas para problemas de Controle Ótimo Quântico, sendo que, na grande maioria dos casos, são utilizados algoritmos de controle e simulações numéricas para a obtenção dos resultados desejados. Com efeito, em um artigo devido a Caneva e outros autores (CANEVA *et al.*, 2009), os mesmos demonstram numericamente que o Algoritmo de Krotov, por exemplo: (KROTOV, 1995) e (SCHIRMER; De FOUQUIERES, 2011), aplicado ao sistema de Landau-Zener, bem como a um esquema teórico de

transferência de informação em uma cadeia de spin ("One dimensional Heisenberg spin chain of lenght N"), apresentam um tempo de transição próximo ao do "limite de Bhattacharyya", que é equivalente à desigualdade (6.2.16) deduzida, para ambos os sistemas por eles estudados, os quais são adequadamente lá modelados por Hamiltonianos dependentes do tempo (CANEVA et al., 2009).

Com relação ao Fator de Mérito η_t , é fácil perceber que η_t é um número real e adimensional, compreendido no intervalo [0,1]: $\eta_t \in \Re: 0 \leq \eta_t \leq 1$; em que, os extremos correspondem, respectivamente, aos casos em que a transição de estados, ou não foi efetuada (ou o algoritmo de controle empregado não convergiu para o estado-alvo desejado), matematicamente falando, levou um "tempo infinito", ou ao caso de transferência temporal ideal, de máxima eficiência. Naturalmente, o Fator de Mérito η_t pode ser também expresso em forma percentual.

A partir das expressões (6.2.16) e (6.2.17), podemos expressar η_t de forma mais explícita como:

$$\eta_t = \frac{\hbar.\arccos\sqrt{P_t}}{\Delta \hat{H}.t_{COS}}$$
 (6.2.18).

Do ponto de vista de análise dimensional, é fácil checar que η_t é consistente com o requisito de adimensionalidade, pois \hbar tem dimensão de ação (energia × tempo), e o operador de dispersão, ou desvio padrão, do Hamiltoniano do sistema, tem, naturalmente, dimensão de energia.

Se temos em vista uma transferência de estados específica, em um dado Sistema de Controle Quântico de Tempo Mínimo, com tanto o estado inicial - $|\psi_0\rangle$ ou $|\psi_I\rangle$ - como o estado final ou estado-alvo - $|\psi_F\rangle$ ou $|\psi_G\rangle$ - definidos, e tendo aferido computacionalmente (ou, talvez, analiticamente, caso seja possível) o tempo T

decorrido, necessário para efetuar tal transferência, pode-se particularizar (6.2.18) para este caso como se segue:

$$\eta_{T} = \frac{\hbar \arccos\left|\left\langle \psi_{F} \left| \psi_{I} \right\rangle \right|}{\Delta \hat{H} T_{CQS}} \qquad (6.2.19);$$

em que, o argumento da função *arccos* é dado pelo módulo da amplitude de probabilidade da transferência de estados desejada; T_{CQS} é o tempo gasto para tal transferência no sistema quântico controlado; e, $\Delta \hat{H}$ é a dispersão do Hamiltoniano, característico do sistema original (não-controlado).

Muitas vezes, nem sempre é possível em aplicações práticas, em termos de algoritmos de Controle Ótimo e suas simulações numéricas, obter a "transição exata", por assim dizer, para o estado-alvo desejado $|\psi_G\rangle$. Ao invés disso, procuram-se os controles ótimos $u^*(t)$ que maximizam a medida de *Fidelidade Quântica*:

$$F = \left| \left\langle \psi_G \left| \psi_T \right\rangle \right|^2 \quad \text{(6.2.20a);}$$

ou, de forma dual, que minimizam a medida de Infidelidade Quântica:

$$I = 1 - \left| \left\langle \psi_G \left| \psi_T \right\rangle \right|^2 \quad \text{(6.2.20b);}$$

ou seja, aqueles controles para os quais, decorrido o tempo T de controle, a probabilidade de que o estado evoluído no tempo $|\psi(T)\rangle$ seja encontrado no estado-alvo (ou meta) $|\psi_G\rangle$ aproxime-se arbitrariamente de 1. Então, pode-se analisar o desempenho do processo iterativo como uma função de T e mostrar que o método em questão é capaz de produzir infidelidades arbitrariamente próximas de zero (CANEVA et al., 2009).

Tal problema específico, conforme vimos no Capítulo sobre Controle Ótimo (Clássico e Quântico), corresponde, *lato sensu*, ao Problema de Minimização da Distância entre dois Estados.

6.3 JUSTIFICATIVAS HEURÍSTICAS E MATEMÁTICAS SOBRE A APROXIMAÇÃO DE HAMILTONIANO INDEPENDENTE DO TEMPO

Nossas deduções de tempo mínimo, fisicamente possível, para que ocorram transições de estados quânticos, foram obtidas sob a hipótese de um Operador Hamiltoniano independente do tempo, a partir de Relações de Incerteza Tempo-Energia, as quais, por sua vez, são decorrentes da Dinâmica Quântica. Não obstante, sabemos que, no Hamiltoniano do sistema quântico controlado, aparecerão controles u(t), os quais correspondem, do ponto de vista físico, a campos eletromagnéticos, potenciais elétricos, ou a lasers aplicados no sistema, por exemplo, de modo que, no sistema controlado, teremos um $\hat{H} = \hat{H}(u(t))$. Destarte, tentaremos justificar, a seguir, porque tal Fator de Mérito η_b por nós definido, que se vale do hamiltoniano do sistema quântico original, independente do tempo, constitui-se em uma boa aproximação de um parâmetro que pretende quantificar a eficiência de um Controle Quântico Ótimo de Tempo Mínimo.

De um ponto de vista heurístico e qualitativo, sabe-se que, em geral, os controles ótimos u(t) não apenas sofrem pequenas variações temporais ao longo da evolução dinâmica do sistema, como também são limitados em termos de magnitude, o que fisicamente corresponde a limitações da energia de controle disponível (D'ALESSANDRO, 2007).

Ademais, os tempos envolvidos nas transferências de estados quânticos (controladas ou não) são extremamente diminutos 31; com efeito, assim devem o ser, uma vez que se faz necessário, do ponto de vista tecnológico, obter transições de estados quânticos rápidas o bastante para contornar-se o fenômeno de Decoerência Quântica, o qual pode ser entendido como a perda da coerência ou ordenamento de ângulos de fase entre os componentes de um sistema numa superposição quântica. Uma das consegüências deste desordenamento de fases é a adição do comportamento clássico ao sistema. A Decoerência Quântica dá a aparência de colapso de função de onda (redução das possibilidades físicas numa única possibilidade, tal como vista por um observador), o que se traduz em uma perda de Informação Quântica. A decoerência é também o mecanismo, pelo qual o "clássico" emerge do "quântico", por assim dizer, e determina, de certo modo, a localização da fronteira clássico-quântica. O fenômeno ocorre e fica caracterizado quando um dado sistema quântico apresenta interação com o ambiente à sua volta de uma maneira termodinamicamente irreversível (SCHLOSSHAUER, 2008). Portanto, para prevenir que os diferentes elementos, existentes na superposição quântica da função de onda "ambiente mais sistema", interfiram entre si, é mister que o sistema quântico seja controlado em um tempo menor que o chamado tempo de decoerência, característico de um dado sistema em questão. Tais considerações ressaltam a grande relevância científica e tecnológica do Controle Quântico Ótimo de Tempo Mínimo.

Podemos justificar, ainda, nossa aproximação de Hamiltoniano independente do tempo como sendo satisfatória a partir de vários resultados de simulações numéricas, nas quais o operador $\hat{H}(u(t))$ variou pouco no tempo ao longo da evolução dinâmica dos sistemas controlados, ou seja, $\|\hat{H}(u(t))\| \sim \|\hat{H}\|$. Com efeito, Caneva *et al.* (2009), por exemplo, aferiram isso em suas simulações de controle ótimo para os sistemas de Landau-Zener e para a Cadeia de Heisenberg de Spins, de comprimento N.

_

³¹ Experimentalmente falando, na ordem de *pico* a *femto-segundos*, 10⁻¹² s e 10⁻¹⁵ s, respectivamente. Pfeifer (1993) cita, por exemplo, a foto-isomerização de *rhodospin*, durante a qual um massivo rearranjo nuclear ocorre, tendo como tempo característico 200 fs.

Matematicamente, podemos argumentar que, dado um operador linear Q, que habita um Espaço de Hilbert H (espaço métrico, vetorial, normado e dotado de produto interno), bem como um vetor x qualquer, tal que $x \in H$ e $x \neq 0$, temos que:

$$||Q|| = \sup_{x \in H, x \neq 0} \frac{||Qx||}{||x||}$$
 (6.3.1).

Uma variante desta fórmula, que pode ser facilmente obtida a partir de (6.3.1) (KREYSZIG, 1989), é como se segue:

$$||Q|| = \sup_{x \in H, ||x||=1} ||Qx||$$
 (6.3.2).

Dado que os vetores de estados quânticos são, em geral, normalizados, querendo-se dizer com isso que possuem norma unitária, ou seja, $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} = 1$, a expressão acima é mais conveniente para nós, de modo que a reescrevemos em termos do operador Hamiltoniano dependente do tempo - $\hat{H}(t)$ e de $|\psi\rangle$ como:

$$\|\hat{H}(t)\| = \sup_{\psi \in H, \|\psi\|=1} \|\hat{H}(t)|\psi\rangle\|$$
 (6.3.3).

Expressando, agora, o operador Hamiltoniano dependente do tempo como a soma de dois operadores, a saber:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}(u(t))$$
 (6.3.4);

na qual, \hat{H}_0 é o hamiltoniano do sistema quântico original, não controlado; e, $\hat{H}(u(t))$ é a parte dele dependente do tempo, a qual contempla o(s) controle(s) u(t) aplicado(s).

No caso de um sistema quântico de espectro discreto, isto é, com um número finito de autoestados, os quais geram uma base, na qual um estado quântico qualquer pode ser expresso como uma combinação linear dos mesmos (ou superposição quântica), (6.3.4) é usualmente interpretada como sendo a soma de duas matrizes quadradas, em que $\hat{H}(u(t))$ consiste na matriz dos controles u(t) 32.

Reescrevendo-se, agora, (6.3.3) à luz de (6.3.4), ficamos com:

$$\left\|\hat{H}(t)\right\| = \sup_{\psi \in H, \|\psi\| = 1} \left\| \left(\hat{H}_0 + \hat{H}(u(t))\right)\psi\right\rangle \right\| =$$

$$\|\hat{H}(t)\| = \sup_{\psi \in H, \|\psi\| = 1} \|\hat{H}_0 |\psi\rangle + \hat{H}(u(t)) |\psi\rangle \| \le \|\hat{H}_0 |\psi\rangle \| + \|\hat{H}(u(t)) |\psi\rangle \|$$
(6.3.5)

em que usamos, na última passagem, a propriedade de desigualdade triangular da norma, o que nos possibilita expressar (6.3.5) na forma:

$$\|\hat{H}(t)\| = \sup_{\psi \in H, \|\psi\|=1} \|\hat{H}_0|\psi\rangle\| + \|\hat{H}(u(t))|\psi\rangle\|$$
 (6.3.6).

À luz de (6.3.6), podemos argumentar que, se a magnitude ou norma do vetor $\hat{H}(u(t))|\psi\rangle$ for pequena, haja vista os pequenos valores dos esforços de controle u(t), e dado que o *sup* ("supremum" ou "least upper bound") é o menor valor que limita superiormente a norma do operador, a ação do Hamiltoniano original do sistema, \hat{H}_0 , independente do tempo, é preponderante na magnitude do Hamiltoniano do sistema controlado, $\hat{H}(t)$, de modo que, nestas condições, podemos dizer que $\|\hat{H}(t)\| \approx \|\hat{H}_0\|$.

_

³² Embora tenhamos mencionado sistemas quânticos discretos, ressaltamos, aqui, que a argumentação matemática levada a cabo goza de generalidade, de modo que é válida também para sistemas quânticos contínuos.

6.4 APLICAÇÕES A TRANSIÇÕES DE ESTADOS PARTICULARES

Consideremos agora a aplicação das Relações de Incerteza Tempo-Energia (6.2.15) e (6.2.16) a algumas transições específicas de estados quânticos. Escrevendo a desigualdade (6.2.15) de modo a explicitar, em seu lado esquerdo, a probabilidade associada a uma transição de um estado inicial a um estado evoluído no tempo, temos:

$$\left|\left\langle \psi_{t} \left| \psi_{0} \right\rangle \right|^{2} \geq \cos^{2} \left(\frac{\Delta \hat{H}.t}{\hbar} \right)$$
 (6.4.1);

em que, $\Delta \hat{H} = \sqrt{\left\langle \hat{H}^2 \right\rangle_{\psi} - \left\langle \hat{H} \right\rangle_{\psi}^2}$ é a dispersão de \hat{H} ou incerteza na determinação da energia.

Seja uma transição de estados no tempo tal que, partindo-se de um estado qualquer $|\psi\rangle$, a dinâmica do sistema o conduza, mediante a atuação do Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0)$, a um estado ortogonal $|\psi^{\perp}\rangle$ (ou ortonormal, caso a condição de normalização esteja garantida). Esquematicamente, temos então:

 $\left|\psi\right> \rightarrow \hat{U}(t,t_0) \rightarrow \left|\psi^\perp\right>$; com $\hat{U}(t,t_0) = e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$ sendo o operador de evolução temporal para um hamiltoniano \hat{H} independente do tempo, no qual podemos impor $t_0 = 0$.

Adaptando-se (6.4.1) para esse caso, ficamos com:

$$\left|\left\langle \psi \left| \hat{U}(t, t_0) \right| \psi \right\rangle \right|^2 \ge \cos^2 \left(\frac{\Delta \hat{H} t}{\hbar} \right)$$
 (6.4.2);

cuja amplitude de probabilidade associada, $\langle \psi | \hat{U}(t,t_0) | \psi \rangle$, pode ser considerada como uma amplitude de sobrevivência do estado $|\psi\rangle$, que evolui no tempo mediante a atuação do operador $\hat{U}(t,t_0)$; e a incerteza na energia, $\Delta \hat{H}$, dada por:

$$\Delta_{w}\hat{H} = \sqrt{\langle \psi | \hat{H}^{2} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle^{2}}$$
 (6.4.3).

Assim, ocorrendo uma transferência no tempo de estados, de $|\psi\rangle$ para $|\psi^{\perp}\rangle$, a amplitude de probabilidade em (6.4.2) anula-se, de modo que se caracteriza o primeiro instante de tempo t para que isto ocorra como sendo:

$$\tau_{\psi \to \psi \perp} \equiv \inf\{t \ge 0 : \left\langle \psi \left| \hat{U}(t, t_0) \right| \psi \right\rangle = 0\} \quad \text{(6.4.4)}.$$

Logo, também a partir de (6.4.2) 33 , conclui-se que o tempo $au_{\psi \to \psi \perp}$ é limitado inferiormente pela desigualdade:

$$\tau_{\psi \to \psi \perp} \ge \frac{\pi \hbar}{2\Lambda \hat{H}}$$
(6.4.5).

Podemos, então, definir o Fator de Mérito $\eta^{H}_{\psi \to \psi \perp}$ - correspondente à supracitada transição de estados - da seguinte forma:

$$\eta_{\psi \to \psi \perp}^{H} \equiv \frac{\tau_{\psi \to \psi \perp}}{\tau_{COS}}$$
 (6.4.6),

na qual, $au_{\psi \to \psi \perp}$ é o menor tempo fisicamente possível para que ocorra a primeira transição para o estado ortogonal (ortonormal); e, au_{COS} , o tempo gasto efetivamente

 $^{^{33}}$ Devemos ter em mente, aqui e doravante, que ao resolver as inequações de segundo grau associadas a P_t , com o intuito de obter o tempo mínimo e/ou o limite temporal inferior, considera-se sempre a solução matemática que é imbuída do sentido físico desejado.

pelo sistema controlado para realizar tal transferência. Com o auxílio de (6.4.5), somos conduzidos, para este caso, à expressão seguinte:

$$\eta_{\psi \to \psi \perp}^{H} = \frac{\pi \hbar}{2\Delta \hat{H} \tau_{COS}}$$
 (6.4.7).

Vale a pena mencionar, aqui, que tais transições ou transferências entre estados quânticos ortogonais ou ortonormais são de extrema importância para quaisquer esquemas ou dispositivos, sejam de natureza teórica, experimental ou tecnológica, que visem implementar processamento de Informação Quântica e/ou Computação Quântica, e.g., (BOUWMEESTER; EKERT; ZEILINGER, 2000), (NIELSEN; CHUANG, 2000).

6.5 ESTUDO ANALÍTICO DE CASO: SISTEMA DE FAHRI-GUTMANN

Consideremos agora um exemplo de aplicação (LUO, 2004), relacionado a uma formulação devida a Fahri e Gutmann (1998), sobre um modelo de computação quântica digital, que, por sua vez, pode ser interpretado como uma variação do algoritmo de busca quântica, similar ao algoritmo de Grover (GROVER, 1997).

Sejam $|a\rangle$ e $|b\rangle$ os estados inicial e alvo, respectivamente, e o Hamiltoniano do sistema definido como:

$$\hat{H} = E_a |a\rangle\langle a| + E_b |b\rangle\langle b| \qquad (6.5.1);$$

em que, E_a e E_b são constantes positivas.

Tendo em vista, a priori, a dificuldade no tocante ao estado $|a\rangle$ evoluir para o estado $|b\rangle$ de forma exata, pode-se pensar em formular o problema de uma forma menos restritiva, a saber, em termos de uma transição temporal de estados, em menor

tempo possível, de modo a garantir uma máxima fidelidade. Traduzido isto de forma matemática, queremos maximizar

$$F \equiv P_{t} = \left| \left\langle b \left| \hat{U}(t, t_{0}) \right| a \right\rangle \right|^{2} \qquad (6.5.2).$$

Seja $\langle a|b\rangle$ = s. Sem perda de generalidade, assumimos que s seja real, uma vez que um fator de fase pode ser associado a $|a\rangle$ ou a $|b\rangle$. Uma vez que o Hamiltoniano do sistema é da forma (6.5.1), agindo de modo não trivial somente no subespaço gerado pelos autoestados $|a\rangle$ e $|b\rangle$, é suficiente considerar apenas esse subespaço de dimensão 2. Introduz-se, a seguir, a base computacional do modelo, a saber:

$$\{b\rangle, |b'\rangle\}$$
, tal que: $|b'\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-s^2}} (|a\rangle - s|b\rangle)$ (6.5.3),

a qual se constitui em uma base ortonormal para o subespaço gerado por $|a\rangle$ e $|b\rangle$.

Sejam $E = E_a + E_b$, x = Ea - Eb, e definamos:

$$\mu = \sqrt{s^2 + \left(\frac{x}{E}\right)^2 (1 - s^2)}$$
 (6.5.4).

Assumiremos que $E_a>0$ e $E_b>0$. É evidente que $s\leq \mu\leq 1$ e $s=\mu$ se, e somente se, $E_a=E_b$. Na base computacional $\left\{|b\rangle,|b'\rangle\right\}$, os estados $\left|a\rangle\right|$ e $\left|b\rangle\right|$ são representados, respectivamente, pelos vetores:

$$|a\rangle := \begin{pmatrix} s \\ \sqrt{1-s^2} \end{pmatrix}$$
 (6.5.5a) $|b\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (6.5.5b).

Sendo:

$$\lambda = s^2 - \frac{x}{E}(1 - s^2)$$
 (6.5.6),

então, o Hamiltoniano $\hat{H}=E_a |a\rangle\!\langle a|+E_b|b\rangle\!\langle b|$ tem a representação matricial:

$$\hat{H} := \begin{pmatrix} 1 + s^2 - \frac{x}{E} (1 - s^2) & \left(1 + \frac{x}{E} \right) s \sqrt{1 - s^2} \\ \left(1 + \frac{x}{E} \right) s \sqrt{1 - s^2} & 1 - s^2 + \frac{x}{E} (1 - s^2) \end{pmatrix} = \frac{E}{2} \begin{pmatrix} 1 + \lambda & \sqrt{\mu^2 - \lambda^2} \\ \sqrt{\mu^2 - \lambda^2} & 1 - \lambda \end{pmatrix}$$
(6.5.7)

de modo que essa matriz pode ser diagonalizada como se segue:

$$\hat{H} = U \begin{pmatrix} \frac{E}{2} (1 + \mu) & 0 \\ 0 & \frac{E}{2} (1 - \mu) \end{pmatrix} U^{-1}$$
 (6.5.8),

sendo a matriz U,

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{\lambda}{\mu}} & \sqrt{1 - \frac{\lambda}{\mu}} \\ \sqrt{1 - \frac{\lambda}{\mu}} & -\sqrt{1 + \frac{\lambda}{\mu}} \end{pmatrix}$$
 (6.5.9),

correspondente ao operador unitário 34 de diagonalização construído com os autovetores de \hat{H} .

 $^{^{34}}$ Um operador unitário U é tal que $\,U^\dagger U = I\,.$

Após alguns cálculos diretos, embora tediosos, a saber, diagonalizar o Hamiltoniano \hat{H} , dado pela expressão (6.5.7), valendo-se de (6.5.8) e (6.5.9), obtémse, a partir de (6.5.5a) e (6.5.5b), finalmente, a probabilidade de transição temporal P_t (que pode ser interpretada como uma medida de Fidelidade) entre o "estado de busca" $e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}|a\rangle$, ou seja, $|a\rangle$ evoluindo no tempo, e $|b\rangle$, o estado-alvo, como (LUO, 2004):

$$P_{t} = \left| \left\langle b \left| \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) \right| a \right\rangle \right|^{2} = s^{2} \left(\left(\frac{1}{\mu^{2}} - 1\right) \sin^{2}\left(\frac{\mu E t}{2\hbar}\right) + 1 \right)$$
 (6.5.10),

em que consideramos $t_0=0$ no operador de evolução temporal $\hat{U}(t,t_0)=e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$.

Notando que $s \le \mu \le 1$, é fácil ver que o valor máximo da probabilidade P_t (ou fidelidade) - P_{max} - é:

$$P_{\max} = \max_{t \ge 0} P_t = \left(\frac{s}{\mu}\right)^2$$
 (6.5.11);

a qual, bastou-nos impor que o valor da função $\sin^2\!\left(\frac{\mu E t}{2\hbar}\right)$ deveria ser 1 na expressão (6.5.10), para que fosse obtida.

De forma igualmente análoga e simples, uma vez que devemos ter $\sin^2\!\left(\frac{\mu E t}{2\hbar}\right) = 1$, concluímos que o primeiro instante t de tempo, para o qual ocorre máxima probabilidade (ou máxima fidelidade) é dado por:

$$t_{first} = \inf\{t \ge 0 : P_t = P_{\max}\} = \frac{\pi\hbar}{E\mu}$$
 (6.5.12).

Destarte, para o sistema de Fahri-Gutmann, o Fator de Mérito que quantifica, para este caso particular, a eficiência de um Controle Quântico Ótimo de Tempo Mínimo, pode ser definido como:

$$\eta_{FG}^{H} \equiv \frac{t_{first}}{\tau_{COS}} \qquad (6.5.13);$$

em que, τ_{CQS} é o tempo efetivamente gasto no controle de tempo mínimo do sistema; e t_{first} é dado por (6.5.12), de modo que, obtemos, em termos dos parâmetros do sistema, a seguinte expressão para o Fator de Mérito do sistema de Fahri-Gutmann:

$$\eta_{FG}^{H} = \frac{\pi \hbar}{E \mu \tau_{COS}} \qquad (6.5.14).$$

6.6 APLICAÇÕES A TRANSIÇÕES DE ESTADOS ARBITRÁRIAS

Consideremos, agora, dois estados quânticos $|a\rangle$ e $|c\rangle$, tais que $|\langle c|a\rangle|^2 \equiv \cos^2 \phi$, com $\phi \in [0,\pi/2]$. Seja um direcionamento de estados, através de um Hamiltoniano \hat{H} , independente do tempo, tal que leve o sistema do estado $|a\rangle$ para um estado $|c^{\perp}\rangle$, ou seja, ortogonal ao estado $|c\rangle$. Com relação ao estado original $|c\rangle$, temos a seguinte probabilidade de transição temporal:

$$P_{t} = \left| \left\langle c \left| \hat{U}(t, t_{0}) \right| a \right\rangle \right|^{2}$$
 (6.6.1);

com
$$\hat{U}(t,t_0) = e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$$
, fazendo-se $t_0 = 0$.

Podemos, novamente, encarar o estado evoluído no tempo $|a_t\rangle = e^{\frac{-iHt}{\hbar}}|a\rangle$ como um "estado de busca", de modo que, a partir da desigualdade (6.2.7), anteriormente deduzida:

$$\Delta_{at}\hat{H}.\Delta_{at}\hat{R} \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle \hat{R} \rangle_{at}}{dt} \right| \qquad (6.6.2);$$

explicitando-se, aqui, os desvios-padrão, bem como o valor médio do operador \hat{R} , calculados com relação ao estado $|a_t\rangle$, façamos, de modo similar às deduções que conduziram às Relações de Incerteza de Tempo-Energia de Mandelstam-Tamm (expressões 6.2.10-14), com que $\hat{R}=|c\rangle\langle c|$. Analogamente ao que fora obtido, temos também que, o valor médio do operador \hat{R} , $\langle \hat{R} \rangle_{at}$, dado na forma de um operador de projeção $\hat{R}=|c\rangle\langle c|$, corresponde à probabilidade P_t , ou seja, $\langle \hat{R} \rangle_{at}=P_t$, de modo que também podemos escrever $\Delta_{at}\hat{R}=\sqrt{P_t-P_t^2}$. Assim, ficamos com a seguinte inequação diferencial, a qual prontamente reconhecemos, como era de se esperar, como sendo a inequação (6.2.12), deduzida anteriormente:

$$\left|\frac{dP_t}{dt}\right| \le \frac{2\Delta_a \hat{H}}{\hbar} \sqrt{P_t (1 - P_t)} \qquad (6.6.3).$$

Resolvendo (6.6.3), e impondo como condição inicial $P(0) = \cos^2 \phi$, chegamos à relação:

$$P_t \ge \cos^2\left(\frac{\Delta_a \hat{H}t}{\hbar} + \phi\right)$$
 (6.6.4),

a qual, *mutatis mutandis*, é uma variante de uma da Relação de Mandelstam-Tamm (6.2.15), que difere da original pela adição da fase ϕ no argumento da função cosseno, uma vez que, para a solução da inequação diferencial (6.6.3), tomou-se como condição inicial $P(0) = \cos^2 \phi = \left| \langle c \, | \, a \rangle \right|^2$.

Procuremos, então, o menor instante de tempo para o qual ocorre a transferência do estado $|a\rangle$ para um estado $|c^{\perp}\rangle$. Este tempo pode ser expresso como se segue, uma vez que buscamos, a partir de $|a\rangle$, um estado ortogonal de $|c\rangle$, tendo em vista a probabilidade dada por $P_t = \left| \langle c | \hat{U}(t,t_0) | a \rangle \right|^2$ (6.6.1):

$$\tau_{a \to c+} \equiv \inf\{t \ge 0 : P_t = 0\}$$
 (6.6.5).

A partir de (6.6.4), somos levados, por fim, ao primeiro tempo, para o qual $|a\rangle$ evolui para $|c^{\perp}\rangle$:

$$\tau_{a \to c \perp} \ge \frac{\hbar (\pi - 2\phi)}{2\Delta_a \hat{H}}$$
 (6.6.6).

Destarte, podemos definir o Fator de Mérito associado a essa transferência de estados particular como:

$$\eta_{a\to c\perp}^{H} \equiv \frac{\tau_{a\to c\perp}}{\tau_{CQS}} = \frac{\hbar(\pi - 2\phi)}{2\Delta_{a}\hat{H}\tau_{CQS}}$$
 (6.6.7);

em que, τ_{CQS} corresponde ao tempo efetivamente gasto no controle ótimo de tempo mínimo de um sistema quântico assim prescrito.

Consideremos, por fim, uma transferência de estados arbitrária, de um estado $|a\rangle$ inicial, para um estado $|b\rangle$ final. Sejam também $\left|\langle b\,|a\rangle\right|^2\equiv\cos^2\phi$, com $\phi\in\left[0,\pi/2\right]$, e \hat{H} o Hamiltoniano que rege a dinâmica do sistema, com o Operador de Evolução Temporal associado, $\hat{U}(t,t_0)=e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$, com $t_0=0$.

Buscamos, aqui, o primeiro instante de tempo *t* para o qual tenhamos a supracitada transição, de modo que, matematicamente o definimos como:

$$\tau_{a\to b} \equiv \inf\{t \ge 0 : \left| \langle b | \hat{U}(t, t_0) | a \rangle \right|^2 = 1\}$$
(6.6.8).

Fisicamente falando, trata-se, pois, do menor tempo em que ocorre máxima Fidelidade, ou seja, o estado de busca $\left|a_{t}\right\rangle = e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}}\left|a\right\rangle$ evolui para $\left|b\right\rangle$ com probabilidade igual a 1.

Então, o tempo $au_{a o b}$ para o qual a transição temporal de estados $|a\rangle o |b\rangle$ ocorra, é tal que:

$$\tau_{a \to b} \ge \frac{\hbar \phi}{\Delta_a \hat{H}}$$
 (6.6.9).

Provemos, pois, esse resultado, seguindo Luo (2004). Para que $|a\rangle$ evolua para $|b\rangle$, é equivalente que $|a\rangle$ evolua para um estado ortogonal a $|c\rangle$: $|c^{\perp}\rangle$, para qualquer $|c\rangle \perp |b\rangle$. Se $|\langle b|a\rangle|^2 = \cos^2\phi$, com $\phi \in [0,\pi/2]$, então, o máximo valor de $|\langle c|a\rangle|^2$, quando $|c\rangle$ varia entre todos os estados ortogonais a $|b\rangle$, é $\cos^2(\pi/2-\phi)$. Seja, por fim, $b \perp \equiv \{c\rangle : \langle c|b\rangle = 0\}$ o subespaço ortogonal ao estado ao estado $|b\rangle$. Aplicando a desigualdade (6.6.6), deduzida anteriormente, $\tau_{a\to c\perp} \geq \frac{\hbar(\pi-2\phi)}{2\Lambda}$, obtemos:

$$au_{a o b} \geq \max_{|c
angle c
angle \pm L} au_{a o c\perp} = rac{\hbar\phi}{\Delta_a \hat{H}} \quad \Box$$

Esse resultado pode ser interpretado como uma forma alternativa da Relação de Incerteza Tempo-Energia. Do ponto de vista físico, ele nos mostra que o produto do tempo de vida de um estado, em termos do primeiro tempo para que o mesmo evolua temporalmente para um outro estado arbitrário, pela incerteza na energia é limitado inferiormente pela fase entre o estado inicial e o estado final, ou estado alvo. Assim, quanto maior a fase, mais longa é a evolução temporal.

Interessante notar que, se houvéssemos aplicado a Relação de Mandelstam-Tamm original, expressão (6.2.15), obteríamos um limite temporal $t \geq \frac{\hbar \pi}{\Delta_a \hat{H}}$, o qual é, evidentemente, maior que o dado por (6.6.9), uma vez que $\phi \in [0, \pi/2]$.

Caso tivéssemos optado em aplicar a desigualdade (6.6.4) diretamente para a transição de estados $|a\rangle$ para $|b\rangle$, modificando apenas a condição inicial da inequação diferencial (6.6.3), para $P(0)=\cos^2\phi=\left|\left\langle b\left|a\right\rangle\right|^2$, com $\phi\in\left[0,\pi/2\right]$, chegaríamos ao seguinte resultado de tempo mínimo: $\tau_{a\to b}\geq\frac{\hbar(\pi-2\phi)}{2\Delta_a\hat{H}}=\frac{\hbar\pi}{2\Delta_a\hat{H}}$, que corresponde ao caso limite de (6.6.9), uma vez que $P(0)=\cos^2\phi=\left|\left\langle b\left|a\right\rangle\right|^2=1\Rightarrow\phi=0$.

Ademais, se modificássemos a condição inicial da inequação diferencial (6.6.3) para $P(0) = \cos^2 \phi' = \left| \left\langle b^\perp \left| a \right\rangle \right|^2$, com $\phi' \in \left[0, \pi/2 \right]$, obteríamos um resultado de tempo mínimo trivial: $\tau_{a \to b} \geq \frac{\hbar \left(\pi - 2\phi' \right)}{2\Delta_a \hat{H}} = 0$, uma vez que $P(0) = \cos^2 \phi' = \left| \left\langle b^\perp \left| a \right\rangle \right|^2 = 0 \Rightarrow \phi' = \frac{\pi}{2}$, de modo a nada nos acrescentar.

Assim, de posse do notável resultado (6.6.9), podemos, por fim, expressar o Fator de Mérito Temporal, associado à transferência arbitrária de estados $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$, no caso ideal de máxima Fidelidade, como se segue:

$$\eta_{a\to b}^H = \frac{\hbar\phi}{\Delta_a \hat{H} \tau_{COS}} \qquad (6.6.10);$$

em que, au_{CQS} é o tempo efetivamente gasto no Controle Ótimo de Tempo Mínimo para efetuar tal transição de estados, a qual, nem sempre, vale lembrar, é exata em grande parte dos casos práticos de controle envolvendo simulações numéricas. Nestes casos, procura-se maximizar a medida de Fidelidade Quântica, ou, alternativamente, minimizar a Infidelidade Quântica, buscando-se valores arbitrariamente próximos de 1 para a grandeza $\left|\langle \psi_G | \psi(T) \rangle\right|^2$, na qual, $\left| \psi_G \right\rangle$ corresponde ao estado-alvo, e $\left| \psi(T) \right\rangle$ corresponde ao estado de busca evoluído, a partir do estado inicial $\left| \psi_I \right\rangle$, em um determinado tempo T de controle.

7 QUANTIFICANDO O DESEMPENHO DE SISTEMAS DE CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO TEMPORAL: TEMPOS MÍNIMOS DE TRANSIÇÕES DE ESTADOS E FATORES DE MÉRITO ASSOCIADOS NO CASO DE HAMILTONIANOS DEPENDENTES DO TEMPO

7.1 INTRODUÇÃO

No Capítulo 6, a partir de Relações de Incerteza Tempo-Energia, oriundas da Dinâmica Quântica, sendo diferentes, portanto, em essência, das Relações de Incerteza de Heisenberg entre Observáveis Quânticos, as quais emergem, dentro do arcabouço teórico formal da Mecânica Quântica, em função da Incompatibilidade (Não Comutabilidade) entre os mesmos, obtivemos tempos mínimos ou limites temporais inferiores para várias situações de transições de estados quânticos, tanto de cunho teórico geral, bem como para casos específicos de transferências de estados, tendo também estudado uma aplicação dos conceitos desenvolvidos a um sistema quântico que modela um problema particular de Computação Quântica, a saber, o modelo de Fahri-Gutmann.

Demonstramos que tais tempos mínimos ou limites temporais inferiores obtidos são, de acordo com a Mecânica Quântica, os menores fisicamente possíveis para que as dadas transições ou transferências de estados quânticos possam ocorrer. Tal estudo nos deu ensejo para a definição de Fatores de Mérito Temporais, os quais têm como objetivo fornecer uma medida formal e quantitativa para a avaliação do desempenho Controles Ótimos de Tempo Mínimo, quando aplicados no contexto de Sistemas Quânticos.

No Capítulo anterior, valemo-nos da hipótese de Hamiltoniano Independente do Tempo para as transferências de estado gerais e específicas que lá estudamos. Mostramos que tal abordagem constitui-se em uma boa aproximação, fornecendo, para tanto, argumentos de natureza heurística, pautados em aspectos práticos e fenomenológicos subjacentes ao Controle Quântico Ótimo, bem como argumentos mais

formais, de natureza matemática, de modo a respaldar devidamente a aproximação por nós empregada.

No presente Capítulo, iremos estudar tal problemática sob a perspectiva de Hamiltonianos Dependentes do Tempo, os quais, com efeito, são aqueles que efetivamente caracterizam os Sistemas de Controle Quântico, uma vez que, nos Hamiltonianos dos sistemas controlados estão presentes leis de controle do tipo u(t), as quais, do ponto de vista físico, correspondem a potenciais elétricos variantes no tempo V(x,t), ou a campos eletromagnéticos aplicados que também exibem variação temporal, ou mesmo espacial.

Primeiramente, iremos estudar o problema de um ponto vista teórico e geral, considerando Operadores de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0)$ com dependência de Hamiltonianos variantes no tempo, $\hat{H}=\hat{H}(t)$.

Também estudaremos, de forma analítica, um sistema com um Hamiltoniano caracterizado por pulsos de controle dependentes do tempo, a saber, o Modelo de Landau-Zener.

A seguir, valer-nos-emos da abordagem proposta por Pfeifer (1993), para Hamiltonianos dependentes do tempo, com o intuito de desenvolvê-la para a consecução de nossos fins .

Por fim, seguindo os desenvolvimentos de Carlini *et al.* (2006), proporemos um Fator de Mérito Temporal a partir da chamada "*Braquistócrona Quântica*", que determina um tempo mínimo T de evolução do sistema quântico, em analogia ao célebre problema do Cálculo das Variações, proposto primeiramente por Johann Bernoulli em 1696, que consistia em determinar a curva (não trivial), para a qual uma pequena partícula massiva, sob ação de um campo gravitacional constante, deslizasse sem atrito de um ponto A para um ponto B, ambos pertencentes à curva, no menor tempo possível.

7.2 FORMULAÇÃO TEÓRICA GERAL DO PROBLEMA - PRIMEIRO CASO

Consideremos, inicialmente, um Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0)$, com $\hat{H}=\hat{H}(t)$, tal que $[\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)]=0$, $\forall t_1,t_2\in I\subset \Re^+,t_1\neq t_2$; ou seja, o operador Hamiltoniano do sistema quântico varia no tempo, mas, no entanto, comuta sempre para quaisquer instantes de tempo t_1 e t_2 , com $t_1\neq t_2$.

Em Controle Quântico Ótimo, este é, de longe, o caso mais comumente encontrado e estudado, uma vez que se procuram leis de controle u(t) para a otimização de um dado problema de controle, o qual envolve a minimização ou maximização de determinada(s) grandeza(s) dinâmica(s) de interesse. Em especial, para nós, interessa-nos, aqui, a minimização de tempos de transferências entre estados quânticos. Fisicamente falando, este é o caso, por exemplo, de um sistema de spin - $\frac{1}{2}$ (e.g. um elétron) submetido a um campo magnético, cuja magnitude varia no tempo, mas nunca sua direção.

O Operador de Evolução Temporal, associado a tais Hamiltonianos dependentes do tempo, é dado por (SAKURAI, 1994):

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp \left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt' \, \hat{H}(t') \right] \qquad (7.2.1).$$

Assim, dados um estado quântico inicial $|\psi_I\rangle$ e um estado quântico final $|\psi_F\rangle$ (ou estado-alvo ou "meta" $|\psi_G\rangle$), podemos definir o menor tempo fisicamente possível, ou tempo mínimo, para que ocorra a transição entre esses estados, como sendo:

$$t_{\min} = \inf\{t \ge 0 : \left| \left\langle \psi_F \left| \hat{U}(t, t_0) \right| \psi_I \right\rangle \right|^2 = 1\}$$
 (7.2.2);

com $\hat{U}(t,t_0)$ dado pela expressão (7.2.1), tendo em vista que o operador $\hat{U}(t,t_0)$ direciona dinamicamente o estado inicial $|\psi_I
angle$ para o estado final $|\psi_F
angle$ com probabilidade unitária (no caso de máxima Fidelidade Quântica), o que se traduz por $\left|\left\langle \psi_F \left| \hat{U}(t, t_0) \right| \psi_I \right\rangle \right|^2 = 1.$

Podemos, portanto, definir o Fator de Mérito Temporal, associado a essa transferência de estados genérica, como sendo:

$$\eta_{\psi_I \to \psi_F}^{H(t)} \equiv \frac{t_{\min}}{t_{COS}} \qquad (7.2.3);$$

em que, $t_{\textit{CQS}}$ é o tempo efetivamente gasto pelo sistema quântico controlado (ControlledQuantum System), visando a minimização de tempo; e t_{min} é definido, formalmente, de acordo com (7.2.2).

Com relação ao Fator de Mérito $\eta_{\psi_I o \psi_F}^{H(t)}$, tal como definido em sua forma geral (7.2.3), bem como para suas extensões para casos mais específicos, a seguir, é fácil perceber que $\eta[H(t)]$ é um número real e adimensional 35, compreendido no intervalo [0,1]: $\eta[H(t)] \in \Re: 0 \le \eta[H(t)] \le 1$; em que, os extremos correspondem, respectivamente, aos casos em que a transição de estados, ou não foi efetuada (ou o algoritmo de controle empregado não convergiu para o estado-alvo desejado), matematicamente falando, levou um "tempo infinito", ou ao caso de transferência temporal ideal, de máxima eficiência. Naturalmente, o Fator de Mérito $\eta[H(t)]$ pode ser também expresso em forma percentual.

Muitas vezes, nem sempre é possível em aplicações práticas, em termos de algoritmos de Controle Ótimo e suas simulações numéricas, obter a "transição exata",

 $^{^{35}}$ $\eta[H(t)]$ pode ser entendido também como um funcional dos operadores $\hat{H}(t)$ para cada sistema.

por assim dizer, para o estado-alvo desejado $|\psi_G\rangle$. Ao invés disso, procuram-se os controles ótimos $u^*(t)$ que maximizam a medida de *Fidelidade Quântica*:

$$F = \left| \left\langle \psi_G \left| \psi(T) \right\rangle \right|^2$$
 (7.2.4a);

ou, de forma dual, que minimizam a medida de Infidelidade Quântica:

$$I = 1 - \left| \left\langle \psi_G \left| \psi(T) \right\rangle \right|^2$$
 (7.2.4b);

ou seja, aqueles controles para os quais, decorrido o tempo T de evolução temporal do sistema, a probabilidade de que o estado evoluído no tempo $|\psi(T)\rangle$ seja encontrado no estado-alvo (ou meta) $|\psi_G\rangle$ aproxime-se arbitrariamente de 1. Em outras palavras, tenta-se encontrar o tempo T mínimo (analiticamente, se possível) que garante máxima Fidelidade Quântica, ou de forma dual, mínima Infidelidade Quântica.

Destarte, podemos expressar matematicamente tal tempo T mínimo como:

$$T_{\min} = \inf\{T \ge 0 : F = |\langle \psi_G | \psi(T) \rangle|^2 = 1\}$$
 (7.2.5a);

ou, alternativamente,

$$T_{\min} = \inf\{T \ge 0 : I = 1 - |\langle \psi_G | \psi(T) \rangle|^2 = 0\}$$
 (7.2.5b);

de modo que o estado $|\psi(T)\rangle = \hat{U}(T,t_0)|\psi_I\rangle$ pode ser entendido como o "estado de busca", que visa a consecução dos supracitados objetivos de controle. Torna-se natural, destarte, definir os Fatores de Mérito, dentro dessas condições, como sendo:

$$\eta_{F \to 1}^{H(t)} \equiv \frac{T_{\min}}{T_{COS}}$$
 (7.2.6a),

$$\eta_{I \to 0}^{H(t)} \equiv \frac{T_{\min}}{T_{COS}}$$
 (7.2.6b);

nas quais, T_{CQS} é o tempo efetivamente gasto para controlar o sistema de forma algorítmica ou por meio de simulações numéricas; e, T_{min} é o tempo determinado para se alcançar máxima fidelidade ou mínima infidelidade, de acordo com (7.2.5a) ou (7.2.5b), respectivamente.

7.3 ESTUDO ANALÍTICO DE CASO: MODELO DE LANDAU-ZENER

Em linhas gerais, o modelo de Landau-Zener constitui-se em um exemplo paradigmático, bem como em um elemento básico para o controle de sistemas complexos quânticos de muitos corpos, cuja evolução dinâmica, para o caso de sistemas de dimensão finita, pode ser modelada, freqüentemente, como uma cascata de transições Landau-Zener (SANTORO et al., 2002). No contexto da Computação Quântica Adiabática, a qual se constitui em uma abordagem promissora em termos de uma nova classe de algoritmos quânticos, é baseada em dinâmicas quânticas adiabáticas (FAHRI et al., 2001). Sabe-se que a Computação Quântica Adiabática é limitada por cruzamentos evitados no Hamiltoniano dependente do tempo do sistema, e, também, por nossa inabilidade de evitar a excitação do sistema (CANEVA et al., 2009).

Consideremos, a seguir, um modelo básico de um Hamiltoniano Landau-Zener, que representa a passagem através de um nível de cruzamento evitado (CANEVA *et al.*, 2009). Seja, então, o Hamiltoniano LZ que iremos estudar de forma analítica:

$$\hat{H}(\Gamma(t)) = \begin{pmatrix} \Gamma(t) & \omega \\ \omega & -\Gamma(t) \end{pmatrix}$$
 (7.3.1);

em que $\Gamma(t)$ é um pulso ou lei de controle a ser otimizada. O sistema é preparado, inicialmente, em seu *ground state*, $\hat{H}(\Gamma(0))$. O pulso de controle $\Gamma(t)$ é selecionado com base no Teorema Adiabático (MESSIAH, 1965), (SAKURAI, 1994), (ROLAND; CERF, 2002); e é expresso de acordo com a seguinte equação diferencial ordinária não-linear e de primeira ordem (CANEVA *et al.*, 2009):

$$\Gamma(t) = \gamma G^2(\Gamma(t)) \qquad (7.3.2),$$

com:

$$G(\Gamma(t)) = 2\sqrt{\omega^2 + \Gamma^2(t)}$$
 (7.3.3);

na qual, (7.3.3) é o intervalo de energia instantâneo do Hamiltoniano (7.3.1). A partir de (7.3.2) e (7.3.3), escrevemos os pulsos de controle do Hamiltoniano LZ como a seguinte Equação Diferencial Ordinária:

$$\dot{\Gamma}(t) = 4\gamma \left(\omega^2 + \Gamma^2(t)\right) \qquad (7.3.4).$$

Integrando-se (7.3.4) no tempo, obtemos:

$$\int_{0}^{t} \frac{d\Gamma(t')}{\left(\omega^{2} + \Gamma^{2}(t')\right)} = \int_{0}^{t} 4\gamma dt' \Rightarrow \frac{1}{\omega} \arctan\left(\frac{\Gamma(t)}{\omega}\right) - \frac{1}{\omega} \arctan\left(\frac{\Gamma(0)}{\omega}\right) = 4\gamma t \qquad (7.3.5).$$

Valendo-se da seguinte identidade trigonométrica (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1965): $\arctan\alpha\pm\arctan\beta=\arctan\left(\frac{\alpha\pm\beta}{1\mp\alpha\beta}\right)$, bem como de manipulações algébricas simples, chegamos à expressão geral para a lei (pulso) de controle $\Gamma(t)$:

$$\Gamma(t) = \frac{\omega(\Gamma(0) + \omega \tan(4\gamma \omega t))}{\omega - \Gamma(0) \tan(4\gamma \omega t)}$$
 (7.3.6).

A expressão (7.3.6) goza, pois, de total generalidade; e $\Gamma(t)$ depende, naturalmente, dos parâmetros do sistema de Landau-Zener, os quais podem ou devem ser escolhidos conforme a aplicação específica ou particular que se tem em vista do mesmo. $\Gamma(t)$, de acordo com (7.3.6), depende também do valor da função $\Gamma(t)$ para o instante inicial $t_0=0$: $\Gamma(0)$. Sem perda de generalidade, tampouco de consistência matemática, se impusermos $\Gamma(0)=0^{-36}$, ficamos, então, com a seguinte lei ou pulso de controle $\Gamma(t)$:

$$\Gamma(t) = \omega \tan(4\gamma \omega t) \qquad (7.3.7).$$

Necessitamos, a seguir, integrar no tempo $\Gamma(t)$, em (7.3.7), na condição de próximo passo para a obtenção do Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0=0)$, o qual é dado, conforme vimos, pela expressão (7.2.1).

Destarte, calculemos $\int_0^t \Gamma(t')dt' = \int_0^t \omega \tan(4\gamma\omega t')dt'$, de sorte que, após uma mudança simples de variável de integração, obtemos:

2

³⁶ Com efeito, o estado da arte no tocante a pulsos de controle u(t), em Controle Quântico, utilizando-se campos eletromagnéticos, é tal que se pode moldá-los praticamente à vontade (D'ALESSANDRO, 2007), de sorte que, matemática e teoricamente falando, podemos contar com funções arbitrárias. Por exemplo, neste caso em específico, com uma que, logo após o valor inicial nulo, em um instante arbitrariamente pequeno posterior, assuma uma magnitude qualquer, apropriada para os fins de controle desejados.

$$\int_{0}^{t} \Gamma(t')dt' = \frac{-\ln\left|\cos(4\gamma\omega t)\right|}{4\gamma} \qquad (7.3.8).$$

Finalmente, de posse das expressões (7.2.1), (7.3.1) e (7.3.8), podemos escrever o Operador de Evolução Temporal para o Sistema de Landau-Zener, como se segue:

$$\hat{U}(t,t_0=0) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t dt' \hat{H}(\Gamma(t'))\right] =$$

$$\hat{U}(t, t_0 = 0) = \exp \left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_0^t dt' \begin{pmatrix} \Gamma(t') & \omega \\ \omega & -\Gamma(t') \end{pmatrix} \right] =$$

$$\hat{U}(t, t_0 = 0) = \exp \left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \begin{pmatrix} \frac{-\ln|\cos(4\gamma\omega t)|}{4\gamma} & \omega t \\ \omega t & \frac{\ln|\cos(4\gamma\omega t)|}{4\gamma} \end{pmatrix} \right]$$
(7.3.9).

Assim, tendo determinado o Operador de Evolução Temporal $\hat{U}_{LZ}(t,t_0=0)$ para o Sistema LZ - expressão (7.3.9) - podemos escrever a probabilidade P(t) de transição entre dois estados quânticos genéricos, inicial e final, $|\psi_I\rangle$ e $|\psi_F\rangle$, respectivamente, como sendo:

$$P(t) = \left| \left\langle \psi_F \left| \hat{U}_{LZ}(t, t_0 = 0) \right| \psi_I \right\rangle \right|^2$$
 (7.3.10);

de sorte que, formalmente, podemos escrever o menor tempo fisicamente possível (ou tempo mínimo) de transição de estados, para que o estado de busca, ou seja, o estado

inicial $|\psi_I\rangle$ (ou $|\psi(t_0=0)\rangle$) evoluindo no tempo convirja para o estado final (ou estado-alvo) desejado, $|\psi_F\rangle$, com probabilidade igual a 1, como sendo:

$$t_{\min}^{LZ} \equiv \inf\{t \ge 0 : \left| \langle \psi_F | \hat{U}_{LZ}(t, t_0 = 0) | \psi_I \rangle \right|^2 = 1 \}$$
 (7.3.11),

de modo que temos, por fim, o ensejo necessário para definir o Fator de Mérito associado ao Sistema de Landau-Zener:

$$\eta_{\min}^{LZ} \equiv \frac{t_{\min}^{LZ}}{\tau_{COS}} \qquad (7.3.12),$$

em que, t_{\min}^{LZ} é o menor tempo possível, analiticamente determinado (7.3.11), para que ocorra a supracitada transição genérica de estados; e, τ_{CQS} é o tempo efetivamente gasto para se efetuar a transferência de estados por meio de um algoritmo de Controle Ótimo e/ou simulação computacional.

É importante ressaltar, aqui, que, uma vez conhecidos os valores numéricos dos parâmetros do sistema, bem como expressos os estados quânticos $|\psi_I\rangle$ e $|\psi_F\rangle$ em termos de suas representações vetoriais, com respeito a uma base adequada, a qual dependerá da aplicação específica que se tem em vista para o Sistema LZ, o **tempo mínimo** t_{\min}^{LZ} , dado por (7.3.11), pode ser facilmente determinado de forma numérica. Com efeito, a probabilidade (7.3.10) será dada por uma função escalar, positivadefinida, dependente, por sua vez, das funções presentes em $\hat{U}_{LZ}(t,t_0=0)$ (7.3.9). E, por conseguinte, seremos capazes de quantificar adequadamente o desempenho de algum algoritmo de Controle Ótimo, empregado para a solução numérica do problema, através do **Fator de Mérito** η_{\min}^{LZ} , definido pela expressão (7.3.12).

Por fim, destacamos que nossa abordagem é puramente analítica, de modo que apresenta vantagens significativas sobre o tratamento levado a cabo por Caneva *et al.* (2009) para o Sistema de Landau-Zener. Com efeito, naquele trabalho, o método empregado consistiu em analisar o desempenho do processo iterativo ³⁷ como uma função do tempo T de controle ótimo, executando-se, para tanto, várias simulações numéricas, até obter-se o melhor resultado temporal possível, ou seja, determinar o tempo T de controle que era capaz de produzir infidelidades arbitrariamente próximas de zero, e, ao mesmo tempo, aproximar-se do chamado "Limite de Bhattacharyya", o qual é uma aproximação que se vale de Hamiltonianos independentes do tempo (BHATTACHARYYA, 1983), (LISBOA; PIQUEIRA, 2014a).

7.4 FORMULAÇÃO TEÓRICA GERAL DO PROBLEMA - SEGUNDO CASO

O caso mais geral possível de evolução temporal, regida por um operador Hamiltoniano dependente do tempo, na Mecânica Quântica, é aquele em que $\hat{H} = \hat{H}(t)$ não comuta para tempos distintos. Com efeito, seja um Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0)$, com $\hat{H} = \hat{H}(t)$, tal que $[\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)] \neq 0$, $\forall t_1,t_2 \in I \subset \Re^+$: $t_1 \neq t_2$. Ou seja, o operador Hamiltoniano do sistema quântico em questão também varia no tempo, mas, no entanto, **não** comuta para quaisquer instantes de tempo t_1 e t_2 , com $t_1 \neq t_2$.

Do ponto de vista físico, este é o caso, por exemplo, de um sistema de spin - ½ (e.g. um elétron) submetido a um campo magnético, cuja magnitude varia no tempo, assim como sua direção; digamos, de forma geral, um campo magnético $\vec{B} \equiv B(x,y,z,t)$.

Não é comum encontrarmos na literatura de Controle Quântico um sistema desta natureza, haja vista que a grande maioria das leis de controle empregadas são do tipo u(t), fisicamente implementadas por potenciais elétricos ou campos eletromagnéticos

³⁷ Utilizou-se, lá, o algoritmo de Krotov, *e.g.* (KROTOV, 1995) e (SCHIRMER; De FOUQUIERES, 2011).

variantes no tempo apenas. No entanto, podemos citar, neste sentido, o trabalho de Wu, Sola e Rabitz (2004), no qual os autores procuram demonstrar vantagens dinâmicas ao se utilizarem até três campos de polarização simultaneamente, variantes no tempo e independentemente moldados, conforme o diagrama abaixo:

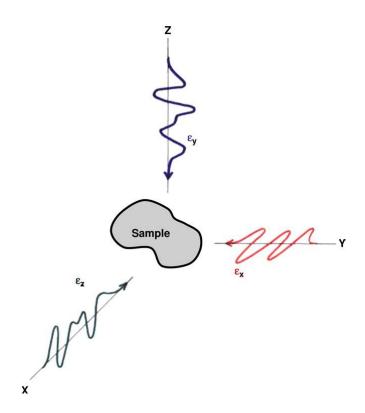


Fig. 7.4.1 - Três componentes ortogonais de polarização do campo elétrico E(x,y,z,t), as quais podem ser moldadas de forma independente (WU, SOLA, RABITZ, 2004)

Retornando, agora, às nossas digressões de natureza teórica, um Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t,t_0)$, com $\hat{H}=\hat{H}(t)$, tal que $[\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)]\neq 0$, $\forall t_1,t_2\in I\subset\mathfrak{R}^+$, para $t_1\neq t_2$, tem solução formal dada pela seguinte expressão (SAKURAI, 1994):

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 ... \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_3) ... \hat{H}(t_n)$$
 (7.4.1);

a qual, por vezes, é também designada como Séries de Dyson, em virtude dos trabalhos do físico anglo-americano Freeman J. Dyson, que desenvolveu tais séries de expansão perturbativa no contexto da Teoria Quântica de Campos (SREDNICKI, 2007).

Em termos de uma transição de estados quânticos genérica, de um estado inicial $|\psi_I\rangle$ a um estado final desejado $|\psi_F\rangle$, meta de controle, para um sistema quântico, cuja evolução temporal é dada por um operador $\hat{U}(t,t_0)$ da forma (7.4.1), escrevamos a probabilidade P(t) associada:

$$P(t) = \left| \left\langle \psi_F \left| \hat{U}_{NC}^{H(t)}(t, t_0) \right| \psi_I \right\rangle \right|^2$$
 (7.4.2),

na qual adotamos a notação "NC" (Noncommutative) para $\hat{U}(t,t_0)$, no afã de destacar, de forma explícita, que o operador Hamiltoniano dependente do tempo, $\hat{H}=\hat{H}(t)$, associado, não comuta para instantes de tempo diferentes.

Assim, é natural definir o tempo mínimo de transição de estados como sendo:

$$t_{\min} = \inf\{t \ge 0 : \left| \left\langle \psi_F \left| \hat{U}_{NC}^{H(t)}(t, t_0) \right| \psi_I \right\rangle \right|^2 = 1 \}$$
 (7.4.3).

Ademais, podemos definir o **Fator de Mérito Temporal**, associado a essa transferência de estados genérica, com um tal operador de evolução temporal $\hat{U}_{NC}^{H(t)}(t,t_0)$, como sendo:

$$\eta_{\psi_I \to \psi_F}^{H(t)NC} \equiv \frac{t_{\min}}{t_{COS}}$$
 (7.4.4);

em que, t_{CQS} é o tempo efetivamente gasto pelo sistema quântico controlado (*Controlled Quantum System*), visando a minimização de tempo; e, t_{min} é definido, formalmente, de

acordo com (7.4.3), ou seja, é o menor tempo fisicamente possível para que ocorra a transição de estados desejada, no contexto de um sistema quântico desta natureza.

7.5 DESENVOLVIMENTOS TEÓRICOS A PARTIR DA ABORDAGEM PROPOSTA POR PFEIFER (1993) PARA SISTEMAS QUÂNTICOS COM H = H(t)

Consideremos, inicialmente, a Equação de Schrödinger que leva em conta um Hamiltoniano dependente do tempo, na forma $\hat{H} = \hat{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$
 (7.5.1),

com um estado que evolui no tempo, $\left|\psi(t)\right\rangle$, a partir de um dado estado inicial $\left|\psi_{0}\right\rangle$.

A partir da equação de Schrödinger (7.5.1), Pfeifer (1993) propôs a seguinte expressão para a incerteza na energia (desvio padrão) de um sistema quântico com um Hamiltoniano dependente do tempo, da forma $\hat{H} = \hat{H}(t)$:

$$\Delta(\hat{H}(t), |\psi(t)\rangle, |\dot{\psi}(t)\rangle) = \hbar \left\| (\hat{1} - |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|) \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \right\|$$
 (7.5.2).

Na expressão (7.5.2), notamos que a incerteza na energia, ou desvio padrão do Hamiltoniano variante no tempo, depende deste Operador, bem como do estado evoluído no tempo e de sua derivada temporal. A partir da expressão original (7.5.2), façamos as seguintes deduções, de modo a chegar a uma expressão mais elegante, sintética e útil aos nossos propósitos:

$$\Delta(\hat{H}(t), \big|\psi(t)\big\rangle) = \hbar \left\| \hat{1} - \big|\psi(t)\big\rangle \langle \psi(t) \big| \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t) \big|\psi(t)\big\rangle \right) \right\| =$$

$$\Delta(\hat{H}(t), \big|\psi(t)\big\rangle) = \hbar \left\| \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t) \big|\psi(t)\big\rangle - \frac{1}{i\hbar} \big\langle \psi(t) \big| \hat{H}(t) \big|\psi(t)\big\rangle \big|\psi(t)\big\rangle \right) \right\| = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t) |\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}$$

$$\Delta(\hat{H}(t), \big|\psi(t)\big\rangle) = \hbar \left|\frac{1}{i\hbar}\right| \left|\left(\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle - \left\langle\psi(t)\big|\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle\right|\psi(t)\right\rangle\right| = \frac{1}{i\hbar} \left|\left(\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle - \left\langle\psi(t)\big|\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle\right|\psi(t)\right\rangle\right| = \frac{1}{i\hbar} \left|\left(\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle - \left\langle\psi(t)\big|\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle\right|\psi(t)\right\rangle\right| = \frac{1}{i\hbar} \left|\left(\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle - \left\langle\psi(t)\big|\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big\rangle\right|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left|\left(\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big\rangle - \left\langle\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big\rangle\right|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left|\left(\hat{H}(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big|\psi(t)\big$$

$$\Delta(\hat{H}(t), |\psi(t)\rangle) = \left\|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle - \left\langle\hat{H}(t)\right\rangle_{\psi(t)}|\psi(t)\rangle\right\|$$
 (7.5.3);

sendo que, na primeira passagem, substituímos a derivada temporal de $|\psi(t)\rangle$, valendonos de (7.5.1), eliminando a dependência de $|\dot{\psi}(t)\rangle$ em (7.5.2); bem como eliminamos, com isso, o produto externo $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ e a constante \hbar (segunda e terceira passagens, respectivamente), de modo a expressarmos $\Delta(\hat{H}(t),|\psi(t)\rangle)$ como um funcional do vetor $\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$ e do estado que evolui no tempo $|\psi(t)\rangle$, multiplicado pelo escalar valor esperado do Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ (7.5.3).

Em termos práticos, se pensarmos em um sistema quântico controlado de dimensão finita 38 , como, por exemplo, o sistema de Landau-Zener, que estudamos na Seção 2, poderíamos obter, com relativa facilidade, a incerteza na energia, variante no tempo, para o sistema, necessitando-se, para isso, apenas da representação matricial de $\hat{H}(t)$ e do estado $|\psi(t)\rangle$; dada uma base conveniente, em que pudéssemos representá-lo vetorialmente, uma vez munidos do estado inicial $|\psi_0\rangle$ do sistema e do operador de evolução temporal $\hat{U}(t,t_0)$, obtido a partir de $\hat{H}(t)$. No caso de uma aproximação de Hamiltoniano independente do tempo, como as que utilizamos no

-

Embora tenhamos mencionado sistemas quânticos de dimensão finita (com espectro discreto de autovalores), tal formalismo, aqui desenvolvido, é válido também para sistemas de espectro contínuo ou dimensão infinita.

Capítulo 6, e em (LISBOA, PIQUEIRA, 2004a), tais cálculos seriam tanto mais simplificados.

Pensemos, agora, numa Relação de Incerteza Tempo-Energia do tipo $\Delta E.\Delta t \approx \hbar$, tal como é deduzida, inicialmente, no caso de Hamiltoniano independente do tempo, em termos de estados estacionários de energia (SAKURAI, 1994). Posteriormente, através de métodos e conceitos de Teoria Perturbativa Dependente do Tempo, Sakurai (1994) mostra que tal relação continua válida no caso dependente do tempo. Destarte, evoquemos, aqui, uma das Relações de Incerteza Tempo-Energia, estabelecidas por Mandelstam e Tamm (1945):

$$\Delta \hat{H}.\Delta T \geq \frac{\hbar}{2}$$
 (7.5.4);

e a expressemos da seguinte forma, tendo em vista as deduções e digressões teóricas anteriores:

$$\Delta(\hat{H}(t), |\psi(t)\rangle).t \ge \frac{\hbar}{2}$$
 (7.5.5);

na qual, consideramos, agora, a incerteza no tempo dependente de um Hamiltoniano $\hat{H}(t)$; e, sem perda de generalidade, impusemos $t_0 = 0$ em ΔT .

Temos, então, o ensejo necessário para definir formalmente o tempo mínimo de uma transição genérica de estados quânticos, entre um estado inicial $|\psi_0\rangle$, que passa a evoluir no tempo, e um estado final, digamos, $|\psi_F\rangle = |\psi(T)\rangle$, podendo, assim, também ser definido em função de um instante de tempo T, no qual o mesmo é alcançado e/ou caracterizado:

$$t_{\min} = \inf\{t \ge 0 : P(t) = |\langle \psi_F | \psi(t, t_0) \rangle|^2 = 1\} = T$$
 (7.5.6);

ou ainda, em termos da máxima fidelidade possível:

$$t_{\min} = \inf\{t \ge 0 : F = \left| \left\langle \psi_F \left| \psi(t, t_0) \right\rangle \right|^2 \to 1\} = T \qquad (7.5.7).$$

Finalmente, em função de (7.5.5), temos:

$$t_{\min} \ge \frac{\hbar/2}{\Delta(\hat{H}(t), |\psi(t)\rangle)} \qquad (7.5.8);$$

de modo que, valendo-nos de (7.5.7) e (7.5.8), definimos o **Fator de Mérito Temporal** associado:

$$\eta_{\psi_0 \to \psi_F}^{H(t)} \equiv \frac{t_{\min}}{t_{COS}} = \frac{T_{\psi(0) \to \psi(T)}}{T_{COS}}$$
 (7.5.9),

e o expressamos como sendo:

$$\eta_{\psi_0 \to \psi_F}^{H(t)} = \frac{\hbar/2}{\left\|\hat{H}(T)|\psi(T)\right\rangle - \left\langle\hat{H}(T)\right\rangle_{\psi(T)} |\psi(T)\rangle} \tag{7.5.10};$$

nas quais, $t_{\min} = T_{\psi(0) \to \psi(T)}$ é o menor tempo fisicamente possível, analiticamente determinado em nossas deduções, para que ocorra a transição de estados quânticos entre $|\psi_0\rangle$ e $|\psi_F\rangle = |\psi(T)\rangle$; e, T_{CQS} é o tempo gasto para se efetuar a transferência de estados por meio de um algoritmo de Controle Ótimo e/ou através de simulação(ões) computacional(is).

Alternativamente, poder-se-ia, ainda, definir o Fator de Mérito $\eta_{\psi_0 \to \psi_F}^{H(t)}$ em termos da incerteza de energia original (7.5.2), $\Delta(\hat{H}(t),|\psi(t)\rangle,|\dot{\psi}(t)\rangle)$, caso nos fosse mais

conveniente para algum problema específico; por exemplo, se dispuséssemos mais facilmente da derivada temporal do estado $|\psi(t)\rangle$ - $|\dot{\psi}(t)\rangle$ - calculada em t=T:

$$\eta_{\psi_0 \to \psi_F}^{H(t)} = \frac{1/2}{\left\| \left(\hat{1} - \left| \psi(T) \right\rangle \left\langle \psi(T) \right| \left(\frac{\partial \left| \psi(t) \right\rangle}{\partial t} \right|_{t=T} \right) \right\| T_{CQS}}$$
(7.5.11).

7.6 A BRAQUISTÓCRONA QUÂNTICA E SEU FATOR DE MÉRITO

7.6.1 Introdução

O problema inaugural e, provavelmente, o mais célebre do ramo da Análise conhecido como Cálculo das Variações, é o problema que diz respeito a encontrar a curva de deslizamento mais rápido, ou "braquistócrona" ³⁹; ou seja, determinar a curva, sobre a qual uma partícula de massa *m*, sob a ação de um campo gravitacional constante *g*, partindo de um ponto inicial fixado, chegasse ao ponto final, ou referencial de menor potencial gravitacional, no tempo mais breve possível, desconsiderando-se, naturalmente, a solução trivial que consiste em um segmento de reta vertical, perpendicular ao referencial horizontal, de menor potencial gravitacional.

Tal problema foi formulado e proposto por Johann Bernoulli, em 1696, como desafio aos maiores matemáticos europeus da época, entre eles, Guillaume de L'Hôpital, Isaac Newton, Gottfried Leibniz, Ehrenfried von Tschirnhaus e Jacob Bernoulli, irmão mais velho de Johann. O desafio de Johann Bernoulli foi proposto na edição de junho de 1696 da *Acta Eruditorum*, como um "Convite a todos os matemáticos para a solução de um novo problema". Ao final do desafio, Bernoulli, que já havia encontrado a solução do problema, afirma que a divulgaria, ao final do ano daquele ano, caso ninguém tivesse a encontrado. Adicionalmente, ele forneceu uma

_

³⁹ Do grego "βραχηστος": brevíssimo e "χρονος": tempo.

pista, ao dizer que se tratava de uma curva bem conhecida entre os geômetras (SUSSMANN; WILLEMS, 1997).

Por sugestão posterior de Leibniz, Bernoulli estendeu o prazo até a Páscoa de 1697, embora, o próprio Leibniz já havia resolvido o problema naquele mesmo mês, enviando-a para o desafiante em uma carta datada de 16 de Junho de 1696, chamando o problema de "esplêndido". Seis matemáticos resolveram, de forma independente, o problema proposto. Além do desafiante e de Leibniz, remeteram suas soluções em cartas endereçadas a Johann Bernoulli: seu irmão, Jacob Bernoulli, Tschirnhaus, L'Hôpital, e, por fim, Isaac Newton. Newton enviou sua carta de forma anônima ao desafiante. Contudo, ao ler a solução vinda da Inglaterra, Bernoulli prontamente identificou seu autor "como se reconhece o leão por suas garras" ("ex ungue leonem") - teria dito. (SUSSMANN; WILLEMS, 1997).

Após esse breve interlúdio histórico, vejamos como o problema da Braquistócrona pode ser expresso e resolvido, valendo-se do Cálculo das Variações, e de notação matemática moderna. Para este fim, é bastante útil visualizarmos, inicialmente, o seguinte diagrama:

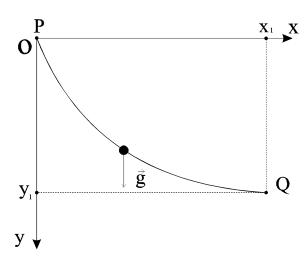


Fig. 1 - A curva de deslizamento mais rápido - braquistócrona - no plano cartesiano.

Escolhendo-se a origem como sendo o ponto P, e orientando-se, conveniente os eixos coordenados \mathbf{x} e \mathbf{y} , conforme o diagrama acima, depois de cair de uma altura \mathbf{y} , o módulo da velocidade \mathbf{v} da partícula, sujeita a um campo gravitacional \mathbf{g} , é, tendo em vista o Teorema de Conservação da Energia da Mecânica Clássica:

$$v = \frac{ds}{dt} = \sqrt{2gy}$$
 (7.6.1.1).

Usando-se $ds = \sqrt{1 + y'^2} dx$, o tempo gasto pela partícula para deslizar da posição P = (0,0) até $Q = (x_1,y_1)$ é dado por:

$$T[y] = \int_{P}^{Q} \frac{ds}{v} = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_{0}^{x_{1}} \left(\frac{1 + y'^{2}}{y} \right)^{\frac{1}{2}} dx \qquad (7.6.1.2);$$

com y(0) = 0 e $y(x_1) = y_1$. Notemos que o tempo T é um funcional da função y(x), e que $y' \equiv \frac{dy(x)}{dx}$.

A resolução deste problema é facilitada pela escolha de y como a variável independente, deixando a curva procurada na forma: x(y). Neste caso, ficamos com $x' \equiv \frac{dx(y)}{dy}$, de modo que, o tempo T, agora funcional da função x(y), passa a ser dado, mutatis mutandis, pela seguinte expressão:

$$T[x] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_{0}^{y_1} \left(\frac{1 + x'^2}{y} \right)^{\frac{1}{2}} dy$$
 (7.6.1.3),

com x(0) = 0 e $x(y_1) = x_1$.

Para o problema, assim formulado, temos a seguinte função como o integrando de (7.6.1.3):

$$f(x, x', y) = \sqrt{\frac{(1+x'^2)}{y}}$$
 (7.6.1.4).

As equações (7.6.1.3) e (7.6.1.4) podem ser entendidas, dentro da linguagem do Cálculo das Variações, como um funcional $J[x,x',y]=\int\limits_0^{y_1}f(x,x',y)dy$, tal que $J:F\to\Re$, sendo F um dado espaço de funções, com $x(y)\in F$; e, f(x,x',y), $f:\Re^3\to\Re$, uma função conhecida.

O problema variacional, que aqui se manifesta, consiste em encontrar uma função x(y), dentre todas as curvas continuamente diferenciáveis, que passam pelos pontos fixos P e Q dados, aquela que minimiza (de forma mais geral, que seja um extremante) do funcional J[x,x',y]. Sem entrarmos, aqui, em maiores detalhes e minúcias teóricas de Cálculo das Variações - sugerimos para tanto, ao leitor interessado, (GELFAND; FOMIN, 1963), ou ainda, algum bom texto de Mecânica Analítica, como (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2001) e (LEMOS, 2007) - restringiremos a asserverar que, deve-se impor que a primeira variação do funcional seja nula, ou seja, $\delta J[x,x',y]=0$, de modo que, com isso obtém-se a Equação de Euler associada:

$$\delta J[x(y), x'(y), y] = \delta \int_{y_0}^{y_1} f(x, x', y) dy = 0 \Rightarrow$$

$$\delta J[x(y), x'(y), y] = \int_{y_0}^{y_1} \delta f(x, x', y) dy = \int_{y_0}^{y_1} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \delta x + \frac{\partial f}{\partial x'} \delta x' \right) dy = 0$$
 (7.6.1.5);

lembrando que, aqui, escolhemos a variável y como sendo a variável independente. Precisamos nos livrar da variação $\delta x' = \frac{d \, \delta x}{dy}$. Para tanto, usamos o seguinte artifício, o qual, no fundo, trata-se de uma integração por partes:

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\delta x\right) = \frac{d}{dy}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\delta x + \frac{\partial f}{\partial x'}\frac{d\delta x}{dy} \Rightarrow (7.6.1.6)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x'}\frac{d\delta x}{dy} = \frac{d}{dy}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\delta x\right) - \frac{d}{dy}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\delta x \qquad (7.6.1.7).$$

Note-se, agora, que o segundo termo do integrando de (7.6.1.5), aquele que contém a derivada da variação δx , pode ser substituído pelo lado direito da expressão (7.6.1.7), de modo que, reescrevendo a integral (7.6.1.5), ficamos com:

$$\int_{y_0}^{y_1} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \, \delta x + \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \, \delta x \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right) \delta x \right) dy = 0 \qquad (7.6.1.8).$$

Reescrevendo a integral (7.6.1.8) como:

$$\int_{y_0}^{y_1} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \, \delta x - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right) \delta x \right) dy + \int_{y_0}^{y_1} \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \, \delta x \right) dy = 0 \qquad (7.6.1.9),$$

podemos calcular imediatamente a segunda integral:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x'} \delta x\right)_{y_0}^{y_1} = \frac{\partial f}{\partial x'} \left(\delta x(y_1) - \delta x(y_0)\right) = 0 \quad (7.6.1.10),$$

o que decorre do fato que as variações nos pontos extremos devem ser nulas. Com efeito, nesse problema de Cálculo das Variações, procuramos por uma função específica, x(y), aquela que é a extremante, entre todas as funções diferenciáveis

possíveis, que passem, obrigatoriamente, pelos extremos. Destarte, sempre teremos, nessa classe de problemas variacionais, que $\delta x(y_1) = \delta x(y_0) = 0$. Logo, a integral (7.6.1.9) assume a forma:

$$\int_{y_0}^{y_1} \left(\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right) \right) \delta x dy = 0$$
 (7.6.1.10).

Precisamos evocar, agora, o Lema Fundamental do Cálculo das Variações:

Lema: Seja M(x) uma função contínua, definida no intervalo $x_1 \le x \le x_2$, tal que $\int\limits_{x_1}^{x_2} M(x) \eta(x) dx = 0$. Então, para qualquer função contínua $\eta(x)$, com $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$, temos que M(x) = 0 em $x_1 \le x \le x_2$.

Para adaptá-lo aos nossos desenvolvimentos levados a cabo até então, basta mudar a variável independente, uma vez que estávamos usando y como tal, ao invés de x; e tomarmos ciência de que, em Cálculo das Variações, é comum utilizar-se também a seguinte notação variacional: $\delta(x) = \varepsilon \eta(x)$, em que ε é uma constante real qualquer, e $\eta(x)$ representa uma função contínua que deve se anular nos extremos em questão, de modo a podermos escrutinar, matematicamente, todas as funções (ou curvas) possíveis que passam pelos pontos extremos, para encontrarmos, por fim, aquela que minimiza (ou, em geral, extremiza) o funcional desejado. Por isso, em razão de $\delta(x) = \varepsilon \eta(x)$, temos um número infinito de funções que passam pelos extremos desejados. Em outras palavras, $\delta(x) = \varepsilon \eta(x)$ promove variações arbitrárias sobre a curva ótima que efetivamente procuramos, aquela que é a extremante.

Pode-se encontrar uma prova para o Lema Fundamental do Cálculo das Variações em (LEMOS, 2007), e uma prova mais formal e elegante em (GELFAND; FOMIN, 1963). A importância deste Lema reside no fato de que ele nos garante que a

integral (7.6.1.10) anula-se se, e somente se, seu integrando é nulo, de modo que, finalmente, chegamos à Equação de Euler:

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right) = 0 \quad (7.6.1.11),$$

a qual deve ser resolvida para que possamos encontrar a função (ou curva) extremante desejada.

Particularizando isso para o nosso problema, dado pela equação (7.6.1.3), temos:

$$\delta T[x, x', y] = \delta \left(\frac{1}{\sqrt{2g}} \int_{0}^{y_1} \left(\frac{1 + x'^2}{y} \right)^{\frac{1}{2}} dy \right) = 0 \quad (7.6.1.12);$$

de modo que, a partir da Equação de Euler (7.6.1.11) aplicada em (7.6.1.12), obtemos a equação diferencial devemos resolver, no afã de encontrarmos a curva de menor tempo, a braquistócrona:

$$\frac{d}{dv}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right) = 0 \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x'} = C_1 \qquad (7.6.1.13),$$

com:

$$\frac{df}{dx'} = \frac{x'}{\sqrt{y(1+x'^2)}} = C_1 \qquad (7.6.1.14),$$

em que, C_1 é uma constante arbitrária e real. Esta última equação é integrada mais facilmente introduzindo-se o parâmetro $x' = \tan t$. Então, com $C_2 = 1/C_1^2$, ficamos com:

$$y = C_2 \frac{\tan^2 t}{1 + \tan^2 t} = C_2 \sin^2 t =$$

$$y = \frac{C_2}{2} (1 - \cos 2t)$$
 (7.6.1.15).

Tomando-se $x' = \tan t$, temos ainda:

$$dx = \tan t dy = 2C_2 \sin^2 t dt = C_2 (1 - \cos 2t) dt =$$

$$x = \frac{C_2}{2} (2t - \sin 2t) + C_3 \qquad (7.6.1.16).$$

Tendo em vista que $C_3 = 0$, porque y = 0 para x = 0, e fazendo-se $\theta = 2t$, resultam as equações paramétricas de uma família de ciclóides:

$$x = C(\theta - \sin \theta)$$
 (7.6.1.17a);

$$y = C(1 - \cos \theta)$$
 (7.6.1.17b).

A constante $C = C_2 / 2$ é determinada pela condição de que a curva passe pelo ponto $Q = (x_1, y_1)$.

Portanto, a braquistócrona é um arco de ciclóide.

Antes de passarmos para a chamada "Braquistócrona Quântica", objetivo desta Seção, e, dispondo, já, de algum ferramental de Cálculo Variacional, faremos uma breve incursão por conceitos básicos de Mecânica Analítica, em especial, pelo Princípio de Mínima Ação ou Princípio Variacional de Hamilton. A motivação para tanto ficará clara mais adiante, quando abordarmos o equivalente quântico, por assim dizer, da

braquistócrona, ou seja, do menor tempo fisicamente possível entre uma transição de estados quânticos.

7.6.2 Princípio de Hamilton e Equações de Euler-Lagrange

A Mecânica Clássica tal como foi desenvolvida, a partir de fins do século XVIII, por Joseph-Louis Lagrange ⁴⁰, William R. Hamilton, Carl Gustav Jacobi, Siméon Poisson, Emmy Noether, entre outros, também conhecida como Mecânica Analítica, por se basear eminentemente em Análise Matemática, representou um grande avanço com relação à Mecânica Newtoniana, bem como propiciou notáveis progressos na Física Matemática. Com efeito, certos construtos teóricos, surgidos dos esforços pioneiros desses matemáticos, sobrevivem, embora modificados e reinterpretados, ainda hoje, e podem ser encontrados no arcabouço teórico das teorias físicas contemporâneas, como a Mecânica Quântica, a Teoria Quântica de Campos e a Relatividade Geral. Neste sentido, podemos citar a função Lagrangeana, as Equações de Hamilton (e a função respectiva), o Princípio de Mínima Ação de Hamilton, a Equação de Hamilton-Jacobi, os Colchetes de Poisson, a Identidade de Jacobi, o Teorema de Noether, etc.

Em uma primeira instância, a Mecânica Analítica apresentou grande vantagem sobre a Mecânica Newtoniana, pois, enquanto esta última demandava um tratamento totalmente vetorial, tendo que levar em conta as diversas forças de vínculos em um sistema mecânico, o tratamento analítico possibilitava uma abordagem muito mais econômica. Com efeito, a partir de uma única função escalar, conhecida hoje como Lagrangeana, pode-se deduzir, a partir de uma única equação diferencial parcial, todas as equações de movimento de um sistema mecânico, prescindindo-se de todo o equacionamento vetorial das forças atuantes no mesmo, como é característico do tratamento newtoniano. Intimamente relacionado à função lagrangeana, está o Princípio

-

⁴⁰ Em seu monumental tratado "Mécanique Analytique", de 1788, no qual Lagrange usa uma abordagem puramente analítica para problemas de Mecânica, sem precisar apelar para construções ou raciocínios geométricos, afirmava ele, já, no prefácio de sua obra: "On ne trouvera point de Figures dans cet Ouvrage" (LEMOS, 2007).

de Mínima Ação de Hamilton, o qual se constitui em um dos princípios mais profundos e abrangentes da Física.

Descrevamos, sucintamente, o Princípio de Hamilton, sua natureza variacional, bem como sua ligação com a função de Lagrange.

Tendo em vista os conceitos básicos de Cálculo das Variações evocados para deduzir a curva de deslizamento mais rápido, ou "braquistócrona", consideremos as seguintes simples mudanças de notação de certos objetos matemáticos já abordados, dando aos mesmos o status de variáveis dinâmicas:

- 1) $x \rightarrow t$ (x em lugar do y, que utilizamos como a variável independente);
- 2) $y(t) \rightarrow q(t)$: a qual chamaremos de coordenada generalizada ⁴¹;
- 3) $y' = \frac{dy}{dx} \rightarrow \dot{q}(t) = \frac{dq(t)}{dt}$: derivada temporal da coordenada generalizada;
- 4) $f(y,y',x) \rightarrow L(q,\dot{q},t)$: função de Lagrange ou Lagrangeana;
- 5) $J[y, y', x] \rightarrow S(q, \dot{q}, t)$: corresponde, agora, ao funcional Ação.

Assim, a Equação de Euler (7.6.1.11), doravante designada de Equação de Euler-Lagrange, escreve-se como:

Vide (JOSÉ; SALETAN, 1998), (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2001) ou (LEMOS, 2007) para melhor compreensão da amplitude de seu sentido físico. Em um sistema definido em termos de coordenadas cartesianas, os $q_i(t)$ correspondem às coordenadas espaciais x(t), y(t) e z(t).

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (7.6.2.1).$$

A equação (7.6.2.1) decorre, portanto, do princípio variacional conforme vimos, de sorte que, estamos agora em posição de apresentarmos o Princípio de Mínima Ação de Hamilton.

Consideremos, portanto, a seguinte integral, a qual corresponde ao funcional Ação S:

$$S[q, \dot{q}, t] \equiv \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}, t) dt$$
 (7.6.2.2).

O Princípio de Mínima Ação, ou Princípio de Hamilton, corresponde a impor que a (primeira) variação da ação S seja nula, de modo que obteremos, a partir dele, as equações de Euler-Lagrange que descrevem o movimento (dinâmica) do sistema a partir da função escalar de Lagrange, e, a partir da solução das equações de Euler-Lagrange, chegamos à trajetória q(t) que é aquela efetivamente descrita pelo sistema mecânico, entre todas as possíveis (infinitas) trajetórias, que têm o mesmo ponto inicial e o mesmo ponto final; começando suas evoluções dinâmicas a partir do mesmo instante de tempo inicial t_i , e encerrando-as no mesmo instante de tempo final t_i .

Apliquemos então o princípio variacional à equação (7.6.2.2):

$$\delta S[q, \dot{q}, t] = \delta \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}, t) dt = 0 \Rightarrow$$

$$\delta S[q,\dot{q},t] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q} \, \delta q(t) + \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}} \, \delta \dot{q}(t) \right) dt = 0 \qquad (7.6.2.3);$$

notando-se que, aqui, t é a variável independente. Precisamos, novamente, livrar-nos da variação $\delta \dot{q}$. Para tanto, escrevamos a "derivada total", como se segue:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \, \delta q(t) \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \, \delta \dot{q}(t) \Rightarrow$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \ddot{q}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q(t) \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q(t) \qquad (7.6.2.4).$$

Notemos, agora, que o segundo termo do integrando de (7.6.2.3), aquele que contém a derivada da variação δq : $\frac{d}{dt} \delta q(t) = \delta \dot{q}(t)$, pode ser substituído pelo lado direito da expressão (7.6.2.4), de modo que, reescrevendo a integral (7.6.2.3), ficamos com:

$$\delta S[q,\dot{q},t] = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q} \, \delta q(t) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}} \, \delta q(t) \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}} \right) \delta q(t) \right) dt = 0 \quad (7.6.2.5).$$

Reescrevendo a integral (7.6.2.5) como:

$$\delta S[q, \dot{q}, t] = \int_{t}^{t_f} \left(\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q} \delta q(t) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \right) \delta q(t) \right) dt + \int_{t}^{t_f} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \delta q(t) \right) dt = 0,$$

pode-se, então, calcular imediatamente a segunda integral:

$$\left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\right) \delta q(t)\Big|_{t_i}^{t_f} = \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\right) \left(\delta q(t_f) - \delta q(t_i)\right) = 0;$$

uma vez que as variações nos extremos devem ser nulas: $\delta q(t_f) = \delta q(t_i) = 0$. Logo, a integral (7.6.2.5) assume a forma:

$$\delta S[q,\dot{q},t] = \int_{t_1}^{t_f} \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q(t) dt = 0 \quad (7.6.2.6).$$

Uma vez mais, de acordo com o Lema Fundamental do Cálculo das Variações, temos que o integrando de (7.6.2.6) deve ser obrigatoriamente nulo, de sorte que obtemos a Equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \qquad (7.6.2.7).$$

A função lagrangeana é dada por L = T - V; de modo que, para uma partícula, de massa m, em uma coordenada generalizada, temos:

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{m\dot{q}}{2} - V(q, t)$$
 (7.6.2.8).

Resolvendo a equação diferencial parcial de Euler-Lagrange (7.6.2.7), obtemos a trajetória efetivamente descrita pela partícula, bem como sua velocidade. Em outras palavras, a partir de uma única função escalar, a Lagrangeana, obtemos toda a descrição dinâmica de uma partícula, ou, em geral, de um sistema mecânico, recaindo nas mesmas equações diferenciais ordinárias que obteríamos, caso houvéssemos equacionado o sistema através da Mecânica Newtoniana, levando-se em consideração, neste último caso, grandezas vetoriais como forças e acelerações.

Assim, pelo Princípio de Hamilton, dado um sistema mecânico holômono 42 descrito pela lagrangeana $L(q,\dot{q},t)$, seu movimento do instante inicial t_i ao instante final t_i é tal que a ação $S[q,\dot{q},t]=\int\limits_{t_i}^{t_f}L(q,\dot{q},t)dt$ é mínima (de forma mais geral, estacionária) para a trajetória real, mantidos fixos os pontos inicial e final no espaço de fases.

A generalização para o caso de um sistema holônomo de um número qualquer de graus de liberdade, ou *n* coordenadas generalizadas independentes, é imediata. Dada a ação *S* definida por:

$$S[q_1,...,q_n,\dot{q}_1,...,\dot{q}_n,t] \equiv \int_{t_i}^{t_f} L(q_1,...,q_n,\dot{q}_1,...,\dot{q}_n,t)dt$$
 (7.6.2.9);

e consideremos as coordenadas generalizadas com suas respectivas variações:

$$\overline{q}_1(t) = q_1(t) + \delta q_1(t)$$
...
$$\overline{q}_n(t) = q_n(t) + \delta q_n(t)$$
(7.6.2.10);

com as variações $\delta q_1(t),...,\delta q_n(t)$ independentes entre si e arbitrárias, exceto pelas condições de anularem-se nos extremos: $\delta q_k(t_i) = \delta q_k(t_f) = 0$, com k=1,...,n. Destacando-se que é a mútua independência das coordenadas generalizadas que assegura que cada uma delas pode ser variada independentemente das demais.

A variação da ação
$$S = \int_{t_i}^{t_f} L dt$$
 é dada, então, por:

 $^{^{42}}$ É um sistema mecânico tal que, dadas coordenadas arbitrárias $\xi_1,..., \xi_m$, as quais descrevem a configuração do sistema, ou seja a posição de cada uma de suas das partículas, em um instante de tempo t, temos que os vínculos do sistema podem ser expressos por uma relação $f(\xi_1,..., \xi_m,t) = 0$, relação funcional exclusivamente entre as coordenadas, podendo ou não ter o tempo de modo explícito.

$$\delta S[q_1,...,q_n,\dot{q}_1,...,\dot{q}_n,t] = \int_{t_i}^{t_f} \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(q_k,\dot{q}_k,t)}{\partial q_k} \, \delta q_k(t) + \frac{\partial L(q_k,\dot{q}_k,t)}{\partial \dot{q}_k} \, \delta \ddot{q}_k(t) \right) dt \qquad (7.6.2.11);$$

de modo que uma integração por partes fornece:

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k(t) + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k(t) \Big|_{t_i}^{t_f}$$
(7.6.2.12).

Levando-se em conta que as variações das coordenadas generalizadas anulamse nos pontos extremos, temos que $\sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial L(q_k,\dot{q}_k,t)}{\partial \dot{q}_k}\right) \delta q_k(t) \Big|_{t_i}^{t_f} = 0$, de modo que a equação (7.6.2.12) reduz-se a seguinte expressão, já se impondo que a (primeira) variação da ação seja nula:

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k(t) = 0 \quad (7.6.2.13).$$

Uma vez que os $\delta q_k(t)$ são mutuamente independentes, podemos tomar todos iguais a zero, exceto um particular $\delta q_{k0}(t)$. Neste caso, o somatório em (7.6.2.13) reduzse a um único termo particular, aquele correspondente a $k=k_0$. Mas, como $\delta q_{k0}(t)$ é uma função arbitrária, o Lema Fundamental do Cálculo das Variações estabelece que o coeficiente de $\delta q_{k0}(t)$, ou seja, o integrando da equação (7.6.2.13), é identicamente

nulo. Finalmente, como o argumento anterior é aplicável a qualquer k_0 , a qualquer k particular, conclui-se que a expressão (7.6.2.13) equivale a:

$$\frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L(q_k, \dot{q}_k, t)}{\partial \dot{q}_k} = 0 \qquad (7.6.2.14),$$

para k = 1,..., n. Isso completa a dedução das Equações de Euler-Lagrange a partir do princípio variacional $\delta S = 0$, para sistemas mecânicos holônomos, bem como generaliza o Príncipio de Hamilton, ou Princípio da Mínima Ação, para o caso de n coordenadas generalizadas, sendo a ação S dada por (7.6.2.9):

$$S[q_1,...,q_n,\dot{q}_1,...,\dot{q}_n,t] = \int_{t_i}^{t_f} L(q_1,...,q_n,\dot{q}_1,...,\dot{q}_n,t)dt$$
.

Por fim, examinemos o conceito de lagrangeanas equivalentes. Duas lagrangeanas $\overline{L}(q,\dot{q},t)$ e $L(q,\dot{q},t)$ são ditas serem equivalentes, se elas diferem pela derivada no tempo de uma função real f(q,t): $\overline{L}(q,\dot{q},t) = L(q,\dot{q},t) + \frac{d}{dt} f(q,t)^{-43}$, de modo que temos o seguinte:

Teorema: Lagrangeanas equivalentes fornecem as mesmas equações de movimento.

Demonstração: A ação \overline{S} associada a \overline{L} é dada por:

$$\overline{S} = \int_{t_i}^{t_f} \overline{L}(q, \dot{q}, t) dt = \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}, t) dt + \int_{t_i}^{t_f} \frac{d}{dt} f(q, t) dt = S + f(q(t_f), t_f) - f(q(t_i), t_i);$$

⁴³ Tal tipo de transformação é conhecido como transformação de calibre, ou de *gauge*, e pode também ser encontrada no Eletromagnetismo, em termos dos potenciais escalar e vetor, $\varphi(r,t)$ e A(r,t), respectivamente (JACKSON, 1998).

mas, como a variação da ação mantém os extremos $q(t_f)$ e $q(t_i)$ fixos, segue que $\delta \overline{S} = \delta S$. Portanto, as condições $\delta \overline{S} = \delta S = 0$ são idênticas, demonstrando que $\overline{L}(q, \dot{q}, t)$ e $L(q,\dot{q},t)$ produzem exatamente as mesmas equações de movimento \Box .

7.6.3 O Problema Quântico

Consideremos, agora, o problema de otimização no tempo, na Mecânica Quântica. Deseja-se, aqui, minimizar a quantidade total de tempo necessária para se efetuar uma transição de um estado inicial $|\psi_I\rangle$ para um determinado estado final $|\psi_F\rangle$, ambos pertencentes a um espaço de Hilbert H n-dimensional, por uma escolha adequada de um Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}(t)$.

No problema quântico, o estado que evolui no tempo $|\psi(t)\rangle$ e o Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ são as variáveis dinâmicas de interesse, de modo que, em analogia com a "Braquistócrona Clássica", bem como com a Mecânica Clássica Analítica, define-se a seguinte Ação Quântica (CARLINI et al., 2006):

$$S(|\psi(t)\rangle, |\dot{\psi}(t)\rangle, |\phi(t)\rangle, \hat{H}(t), \lambda) = \int L_{QB}(|\psi(t)\rangle, |\dot{\psi}(t)\rangle, |\phi(t)\rangle, \hat{H}(t))dt \quad (7.6.3.1);$$

em que, chamamos, aqui, o integrando de (7.6.3.1) de "Lagrangeana da Braquistócrona Quântica" 44, LQB, e a definiremos, a seguir, de acordo com Carlini et al. (2006), de modo a evitar uma expressão excessivamente longa em nosso trabalho:

Evitamos deliberadamente denominar L de "Lagrangeana Quântica", pois, através do formalismo de Teoria de Campos, aplicado à Mecânica Quântica, pode-se obter a equação de movimento pertinente, ou seja, a Equação de Schrödinger, a partir de uma Densidade de Lagrangeana (ou, simplesmente, lagrangeana, com um certo abuso costumeiro de jargão), valendo-se do princípio variacional aplicado à ação respectiva.

$$L_{QB} = \frac{\sqrt{\left\langle \dot{\psi}(t) \middle| \left(\hat{\mathbf{l}} - \hat{\boldsymbol{\Pi}}(t)\right) \dot{\psi}(t)\right\rangle}}{\Delta_{\psi} \hat{H}(t)} + \left\langle \dot{t} \hbar \left\langle \dot{\phi}(t) \middle| \psi(t) \right\rangle + \left\langle \phi(t) \middle| \hat{H}(t) \middle| \psi(t) \right\rangle + c\right\rangle + \lambda \left(\frac{Tr \tilde{H}^{2}(t)}{2} - \omega^{2}\right)$$

$$(7.6.3.2);$$

na qual, $\hat{\Pi}(t) \equiv \left| \psi(t) \right\rangle \! \left\langle \psi(t) \right|$ é o operador de projeção em termos do estado $\left| \psi(t) \right\rangle$; $\tilde{H}(t)$ é definido por $\tilde{H}(t) \equiv \hat{H}(t) - Tr\hat{H}(t)/n$, ou seja, é a parte do Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ sem seu traço; $\Delta_{\psi}\hat{H}(t) = \sqrt{\left\langle \psi(t) \middle| \hat{H}^2(t) \middle| \psi(t) \right\rangle - \left\langle \psi(t) \middle| \hat{H}(t) \middle| \psi(t) \right\rangle^2}$ é a incerteza na energia (ou raiz quadrada da variância de energia); ω é uma constante real não nula, com dimensão de energia; c é uma constante real; e introduzimos a notação $\left| \dot{\psi}(t) \right\rangle \equiv \frac{d}{dt} \middle| \psi(t) \rangle$, para fins de praticidade. As demais grandezas presentes em (7.6.3.2), as quais, em certo sentido, são acessórias, serão explicadas a sequir.

O primeiro termo em (7.6.3.2) fornece a duração de tempo para a evolução do estado $|\psi(t)\rangle$, expressa em termos do elemento de linha $ds^2 = \langle d\psi(t) | (\hat{\mathbf{l}} - \hat{\Pi}(t)) d\psi(t) \rangle$, em termos da métrica de Fubini-Study no Espaço Projetivo $\mathcal{C}\Pi^{n-1}$ (CARLINI *et al.*, 2006).

O segundo termo de (7.6.3.2) garante, através do multiplicador de Lagrange $|\phi(t)\rangle\in H$, que $|\psi(t)\rangle$ e $\hat{H}(t)$ satisfazem a Equação de Schrödinger, e que, ademais, o quadrado da norma $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$ obedeça a condição de normalização de estado, ou seja, $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1$, $\forall t$.

O terceiro termo do integrando (7.6.3.2), por meio do multiplicador de Lagrange λ , gera um restrição (*constraint*) para o Hamiltoniano $\hat{H}(t)$. Tal restrição se faz necessária, pois, caso contrário, poder-se-ia encontrar uma trajetória com um tempo

arbitrariamente pequeno, apenas mudando-se, para tanto, a escala de $\hat{H}(t)$: $\hat{H}(t) \rightarrow \alpha \hat{H}(t)$, com $\alpha > 1$, de modo a tornar as flutuações de energia $\Delta \hat{H}(t)$ arbitrariamente grandes ⁴⁵. Física e fenomenologicamente falando, tal restrição diz respeito às limitações dos recursos de controle de que dispomos, por exemplo, um campo eletromagnético de magnitude finita.

A restrição é imposta em $\hat{H}(t)$, em vez de $\hat{H}(t)$, uma vez que, a diferença entre o maior e o menor nível de energia em $\hat{H}(t)$, e não o valor dos níveis de energia per se, é relevante para o sistema físico. Ademais, o problema deve ser formulado, do ponto de vista matemático, no espaço projetivo $\mathcal{C}\Pi^{n-1}$, ao invés de no espaço de Hilbert H, no qual habitam os vetores de estado (CARLINI et al., 2006), porque a fase do estado $|\psi(t)\rangle$, em geral, não tem grande significância na Mecânica Quântica, com efeito, um estado quântico multiplicado por uma fase, em geral, um número complexo, continua a representar o mesmo estado físico. De fato, a ação quântica dada por (7.6.3.1) e (7.6.3.2) é invariante sob uma transformação de calibre (gauge), dada por U(1) 46 , do tipo:

$$(|\psi(t)\rangle, \hat{H}(t), |\phi(t)\rangle, \lambda) \rightarrow \left(e^{-i\theta(t)}|\psi(t)\rangle, \hat{H}(t) + \frac{d\theta(t)}{dt}, e^{-i\theta(t)}|\phi(t)\rangle, \lambda\right),$$

em que $\theta(t)$ é uma função real. Notemos aqui, em analogia com as lagrangeanas equivalentes da Mecânica Clássica, ou as transformações de *gauge* do Eletromagnetismo, que o Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ desempenha o papel de potencial de calibre (*gauge*).

⁴⁶ Grupo das matrizes complexas unitárias ($U^{\dagger}U = I$) da Mecânica Quântica, de dimensão 1, no presente caso.

Em princípio, a partir de um ponto de vista *naïve*, poderíamos, dada a relação de incerteza tempoenergia $\Delta H.t \ge \hbar/2$, pensar em tornar o tempo t arbitrariamente pequeno, aumentando-se de forma arbitrária a energia do sistema, o que não é o caso.

Vamos, agora, derivar as equações de movimento. A variação da ação S, dada pelas equações (7.6.3.1) e (7.6.3.2), com respeito a $\left<\phi(t)\right|$ conduz à Equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$
 (7.6.3.3).

Façamos esse cálculo de forma explícita, o que é omitido no artigo de Carlini *et al.* (2006). No entanto, julgamos oportuno e instrutivo fazê-lo em nosso trabalho.

Primeiramente, consideremos a ação quântica S (7.6.3.1-2) expressa em função dos três termos nela presentes, os quais chamaremos de L_1 , L_2 e L_3 :

$$S = \int_{t_1}^{t_f} L_{QB} dt = \int_{t_1}^{t_f} (L_1 + L_2 + L_3) dt = \int_{t_1}^{t_f} L_1 dt + \int_{t_1}^{t_f} L_2 dt + \int_{t_1}^{t_f} L_3 dt$$
 (7.6.3.4).

Ao fazermos a variação $\delta\!S$ com respeito a $\langle\phi(t)|$, notamos, de imediato, que a primeira e a terceira integrais acima se anulam, de modo que ficamos apenas com $\delta\!S = \delta\int\limits_{-t_f}^{t_f} L_2 dt$:

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\frac{\partial L_2}{\partial \langle \phi(t) |} \right) \delta \langle \phi(t) | + \left(\frac{\partial L_2}{\partial \langle \dot{\phi}(t) |} \right) \delta \langle \dot{\phi}(t) | \right] =$$

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\frac{\partial \langle \phi(t) | \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle}{\partial \langle \phi(t) |} \right) \delta \langle \phi(t) | + \left(\frac{\partial \left(i\hbar \langle \dot{\phi}(t) | \psi(t) \rangle \right)}{\partial \langle \dot{\phi}(t) |} \right) \delta \langle \dot{\phi}(t) | \right]$$
(7.6.3.5);

sendo que, na expressão acima, (7.6.3.5), já substituímos o termo L_2 , de acordo com a equação (7.6.3.2). Efetuando-se as derivadas prescritas em (7.6.3.5), ficamos com:

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \Big[\Big(\hat{H}(t) \Big| \psi(t) \Big) \Big\} \delta \Big\langle \phi(t) \Big| + i \hbar \Big(|\psi(t)| \Big) \Big\} \delta \Big\langle \dot{\phi}(t) \Big| \Big]$$
 (7.6.3.6).

Precisamos nos livrar da variação $\delta \langle \dot{\phi}(t) |$ em (7.6.3.6), de modo que, escrevendo-se a "derivada total" (o que corresponde a uma integração por partes):

$$\frac{d}{dt} \Big(i\hbar \big| \psi(t) \big| \delta \big\langle \phi(t) \big| \Big) = i\hbar \frac{d}{dt} \big| \psi(t) \big| \delta \big\langle \phi(t) \big| + i\hbar \big| \psi(t) \big| \delta \big\langle \dot{\phi}(t) \big|,$$

e isolando-se nela o termo com a variação $\left. \delta \left\langle \dot{\phi}(t) \right| \right.$, obtemos a seguinte expressão,

$$i\hbar |\psi(t)\rangle \delta \langle \dot{\phi}(t)| = \frac{d}{dt} (i\hbar |\psi(t)\rangle \delta \langle \phi(t)|) - i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \delta \langle \phi(t)| \qquad (7.6.3.7).$$

Substituindo (7.6.3.7) em (7.6.3.6), obtemos a expressão:

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\hat{H}(t) \middle| \psi(t) \right) \right) \delta \left\langle \phi(t) \middle| + \frac{d}{dt} \left(i\hbar \middle| \psi(t) \right) \delta \left\langle \phi(t) \middle| \right) - i\hbar \frac{d}{dt} \middle| \psi(t) \right\rangle \delta \left\langle \phi(t) \middle| \right] =$$

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\hat{H}(t) | \psi(t) \right) \right] \delta \langle \phi(t) | - i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \delta \langle \phi(t) | \right] + \int_{t_i}^{t_f} \frac{d}{dt} \left(i\hbar | \psi(t) \right) \delta \langle \phi(t) | dt \qquad (7.6.3.8);$$

de modo que a segunda integral em (7.6.3.8) anula-se, da seguinte forma, uma vez que a variação $\delta \langle \phi(t) |$ deve ser zero nos extremos:

$$\int_{t_{i}}^{t_{f}} \frac{d}{dt} \left(i\hbar |\psi(t)\rangle \delta \langle \phi(t)| \right) dt = \left(i\hbar |\psi(t)\rangle \delta \langle \phi(t)| \right)_{t_{i}}^{t_{f}} = 0;$$

assim, ficamos com a seguinte equação para δS :

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\hat{H}(t) | \psi(t) \rangle \right) - i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] \delta \langle \phi(t) | \qquad (7.6.3.9).$$

Por fim, valendo-nos do Lema Fundamental do Cálculo das Variações, e impondo-se nula a variação da ação *S*:

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\left(\hat{H}(t) | \psi(t) \right) - i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] \delta \langle \phi(t) | = 0,$$

somos conduzidos à equação de movimento do sistema, a qual é a Equação de Schrödinger com Hamiltoniano variante no tempo - expressão (7.6.3.3) - conforme gostaríamos de demonstrar:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad \Box.$$

Outro modo (mais direto) de resolvermos esse problema variacional, seria partirmos da Equação de Euler-Lagrange para a respectiva a Lagrangeana de interesse, uma vez que o Príncipio de Mínima Ação (ou ação estacionária, com respeito

a uma primeira variação), está implícito na Equação de Euler-Lagrange. Em nosso caso, em particular, deveríamos resolver:

$$\frac{\partial L_2}{\partial \langle \phi(t) |} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \langle \dot{\phi}(t) |} \right) = 0 \qquad (7.6.3.10),$$

para encontrarmos a equação de movimento desejada, a qual, no caso, resultou na Equação de Schrödinger (7.6.3.3).

Tendo em vista o primeiro termo, L_1 , da Ação Quântica, (7.6.3.1-2), pode-se deduzir facilmente que é válida a seguinte expressão:

$$\langle \dot{\psi}(t) | (\hat{\mathbf{l}} - \hat{\Pi}(t)) \dot{\psi}(t) \rangle = (1/\hbar^2) (\Delta \hat{H}(t))_{w}^{2}$$
 (7.6.3.11).

Para checarmos este fato, basta que utilizemos a definição do projetor: $\hat{\Pi}(t) \equiv \left| \psi(t) \right\rangle \left\langle \psi(t) \right|$, façamos os produtos prescritos; e, a partir da equação de Schrödinger (7.6.3.3), escrevamos as derivadas temporais dos estados $\left| \psi(t) \right\rangle$ nas seguintes formas duais:

$$|\dot{\psi}(t)\rangle = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$
 (7.6.3.3a);

para um estado ket; e:

$$\langle \dot{\psi}(t) | = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^* \langle \psi(t) | \hat{H}^{\dagger}(t)$$
 (7.6.3.3b);

para um estado dual *bra*; lembrando que, para qualquer operador hermiteano, como é o caso do Hamiltoniano, vale sempre a relação (propriedade): $\hat{H}^{\dagger} = \hat{H}$.

A variação da ação S com respeito ao parâmetro λ é trivial, e resulta na restrição:

$$Tr\tilde{H}^{2}(t) = 2\omega^{2}$$
 (7.6.3.12).

A variação da ação S (7.6.3.1-2) com respeito a $\langle \psi(t) |$, e valendo-se da Equação de Schrödinger, (7.6.3.3), resulta na sequinte equação:

$$i\hbar \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\hat{H}(t) - \left\langle \hat{H}(t) \right\rangle}{2(\Delta \hat{H}(t))^2} \right) \right] \psi(t) - i\hbar \frac{d}{dt} \left| \phi(t) \right\rangle + \hat{H}(t) \left| \phi(t) \right\rangle = 0 \quad (7.6.3.13).$$

Finalmente, a variação da ação S com respeito a $\hat{H}(t)$, após o uso de (7.6.3.3), implica em:

$$\frac{\{\hat{H},\hat{\Pi}\}-2\langle\hat{H}(t)\rangle\hat{\Pi}}{2(\Delta\hat{H}(t))^{2}}-\lambda\tilde{H}(t)-(|\psi(t)\rangle\langle\phi(t)|+|\phi(t)\rangle\langle\psi(t)|)=0 \qquad (7.6.3.14);$$

na qual, $\left\langle \hat{H}(t) \right\rangle$ é o valor esperado do Hamiltoniano no estado $\left| \psi(t) \right\rangle$; e, $\{\hat{H},\hat{\Pi}\}$ é o anticomutador entre esses dois operadores: $\{\hat{H},\hat{\Pi}\}=\hat{H}\hat{\Pi}+\hat{H}\hat{\Pi}$.

Convém ressaltar, aqui, que os autores também omitem os cálculos variacionais que resultaram nas expressões (7.6.3.13) e (7.6.3.14) em seu artigo (CARLINI *et al.*, 2006), deixando indicados apenas os resultados. Não os levaremos a cabo em nosso trabalho também, no entanto, indicaremos o procedimento para obtê-los a seguir.

Com relação à expressão (7.6.3.13), devemos minimizar a seguinte ação, com respeito ao estado $\langle \psi(t) |$, tendo em vista a relação (7.6.3.4):

$$\delta S = \delta \int (L_1 + L_2) dt = \delta \int L_1 dt + \delta \int L_2 dt \Rightarrow$$

$$\delta S = \int \left[\frac{\partial L_1}{\partial \langle \psi(t) |} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_1}{\partial \langle \dot{\psi}(t) |} \right) \right] \delta \langle \psi(t) | dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \langle \psi(t) |} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \langle \dot{\psi}(t) |} \right) \right] \delta \langle \psi(t) | dt = 0 \quad (7.6.3.15);$$

na qual, já impusemos a variação da ação como sendo nula; e os integrandos já estão na forma de Equações de Euler-Lagrange, de modo que basta que se efetuem, primeiramente, as derivadas prescritas em (7.6.3.15), e, em seguida, eliminem-se os estados os estados $|\dot{\psi}(t)\rangle = \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$ e $|\dot{\phi}(t)\rangle = \frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle$, por meio das equações de Schrödinger duais, (7.6.3.3a) e (7.6.3.3b), para um estado do tipo *ket* ou *bra*, respectivamente.

No caso da expressão (7.6.3.14), todas as parcelas de S entram em cena no cálculo variacional, de modo que temos que minimizar a seguinte integral, com respeito a $\hat{H}(t)$:

$$\delta S = \delta \int (L_1 + L_2 + L_3) dt = \delta \int L_1 dt + \delta \int L_2 dt + \delta \int L_3 dt \Rightarrow$$

$$\delta S = \int \left[\frac{\partial L_1}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_1}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right) \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) dt + \int \left[\frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} - \frac{\partial L_2}{\partial \dot{H}(t)} \right] \delta \hat{H}(t) d$$

$$+\int \left[\frac{\partial L_3}{\partial H(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_3}{\partial \dot{H}(t)}\right)\right] \delta \hat{H}(t) dt = 0 \quad (7.6.3.16).$$

O restante do procedimento é análogo ao descrito acima, para a obtenção de (7.6.3.13) por meio de (7.6.3.15). Apesar de trabalhosos, os cálculos são diretos.

A equação (7.6.3.13) e o traço de (7.6.3.14) implicam que o produto escalar $\langle \psi(t) | \phi(t) \rangle$ é uma constante puramente imaginária. Então, o valor esperado em (7.6.3.14) resulta em $\langle \tilde{H}(t) \rangle = 0$, o qual é equivalente a $\langle \hat{H}(t) \rangle = (Tr\hat{H})/n$, ou a $\tilde{H}(t) = \hat{H}(t) - \langle \hat{H}(t) \rangle$ (CARLINI et al., 2006).

Aplicando-se (7.6.3.14) a $|\psi(t)\rangle$, obtemos:

$$|\phi(t)\rangle = \left[\left(\frac{1}{2(\Delta H(t))^2} - \lambda\right)\widetilde{H}(t) + \langle \psi(t)|\phi(t)\rangle\right]|\psi(t)\rangle$$
 (7.6.3.17),

e, inserindo de volta (7.6.3.17) em (7.6.3.14), resulta:

$$\widetilde{H}(t) = \widetilde{H}(t)\widehat{\Pi}(t) + \widehat{\Pi}(t)\widetilde{H}(t)$$
 (7.6.3.18).

Ademais, a variância de energia $\left(\Delta \hat{H}(t)\right)^2$ é constante, isto é:

$$\left(\Delta \widehat{H}(t)\right)^2 \equiv \left(\Delta E\right)^2 = \left\langle \widetilde{H}^2 \right\rangle = \frac{Tr\widetilde{H}^2}{2} = \omega^2$$
 (7.6.3.19).

Substituindo-se (7.6.3.17) em (7.6.3.13), temos que $\frac{d\left(\lambda \widetilde{H}\right)}{dt}|\psi(t)\rangle = 0$, a qual resulta, após uma multiplicação por $\langle \psi(t)|\hat{H}(t)$: $\langle \psi(t)|\frac{d\left(\lambda \hat{H}\widetilde{H}\right)}{dt}|\psi(t)\rangle = 0$, o que implica que λ é constante. Assim, pode-se, então, obter a expressão:

$$\frac{d\widetilde{H}(t)}{dt} |\widetilde{\psi}(t)\rangle = 0 \quad (7.6.3.20),$$

na qual, introduziu-se o estado:

$$\left|\widetilde{\psi}(t)\right\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{0}^{t}\left\langle \hat{H}(t')\right\rangle dt'\right)$$
 (7.6.3.21).

Como conclusão, chega-se ao fato de que as equações que devem ser resolvidas reduziram-se às equações (7.6.3.18) e (7.6.3.20). A primeira delas fornece uma expressão para o Hamiltoniano ótimo; ao passo que, a segunda fornece a evolução temporal ótima do estado quântico. De fato, o estado $|\widetilde{\psi}(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger com Hamiltoniano $\widetilde{H}(t)$; e, (7.6.3.18) implica que:

$$\widetilde{H}(t) = i\hbar \left(\frac{d \left| \widetilde{\psi}(t) \right\rangle}{dt} \left\langle \widetilde{\psi}(t) \right| - \left| \widetilde{\psi}(t) \right\rangle \frac{d \left\langle \widetilde{\psi}(t) \right|}{dt} \right) \quad (7.6.3.22).$$

A derivada $\frac{d\left|\widetilde{\psi}(t)\right\rangle}{dt}$ é ortogonal ao estado $\left|\widetilde{\psi}(t)\right\rangle$, porque $\left\langle\widetilde{H}(t)\right\rangle=0$. Portanto, a equação (7.6.3.20) pode ser escrita como:

$$\left(\hat{\mathbf{l}} - \widetilde{\mathbf{\Pi}}\right) \frac{d^2}{dt^2} \left|\widetilde{\psi}(t)\right\rangle = 0$$
 (7.6.3.23);

na qual: $\tilde{\Pi} = |\tilde{\psi}(t)\rangle\langle\tilde{\psi}(t)| = \hat{\Pi}(t)$. A expressão (7.6.3.23) corresponde à equação geodésica para a métrica de Fubini-Study no espaço projetivo $\mathcal{C}\Pi^{n-1}$, a qual é sugerida ao se observar que a primeira parcela na ação S (7.6.3.1-2) torna-se $\int ds$ para um desvio padrão de energia constante, do tipo ΔE (CARLINI *et al.*, 2006).

Verifica-se, também, que, a partir de (7.6.3.22) e (7.6.3.23), $\frac{d}{dt}\widetilde{H}(t) = 0$.

Pode-se resolver (7.6.3.23) valendo-se de $(\Delta E)^2 = \omega^2$, de modo que se encontra o seguinte estado:

$$|\widetilde{\psi}(t)\rangle = \cos \omega t |\widetilde{\psi}(0)\rangle + \frac{\sin \omega t}{\omega} \frac{d}{dt} |\widetilde{\psi}(0)\rangle$$
 (7.6.3.24).

É possível reescrever o estado (7.6.3.24), bem como o hamiltoniano $\widetilde{H}(t)$ em termos dos estados inicial $|\psi_i\rangle$ e final $|\psi_f'\rangle$, ortonormalizados pelo Processo de Gram-Schmidt, como sendo (CARLINI *et al.*, 2006):

$$|\widetilde{\psi}(t)\rangle = \cos \omega t |\psi_i\rangle + \sin \omega t |\psi_f'\rangle$$
 (7.6.3.25);

$$\widetilde{H} = i\omega \Big(|\psi_f'\rangle \langle \psi_i| - |\psi_i\rangle \langle \psi_f'| \Big) \qquad (7.6.3.26).$$

Como resultado, o Hamiltoniano geral do sistema é, então, dado por:

$$\widehat{H}(t) = \widetilde{H} + \left\langle \widehat{H}(t) \right\rangle$$
 (7.6.3.27);

em que $\left\langle \widehat{H}(t) \right\rangle$ é uma função real arbitrária, e corresponde ao grau de liberdade de calibre (gauge).

Por fim, a partir de (7.6.3.25), multiplicando-se a expressão por um estado inicial $\langle \psi_i |$, e supondo-se um estado final $|\psi_f \rangle \equiv |\widetilde{\psi}(T)\rangle$, tal que T é o tempo ótimo, obtemos:

$$\langle \psi_i | \widetilde{\psi}(T) \rangle = \cos \omega T \langle \psi_i | \psi_i \rangle + \sin \omega T \langle \psi_i | \psi_f' \rangle \Rightarrow \langle \psi_i | \psi_f \rangle = \cos \omega T$$
 (7.6.3.28),

uma vez que os estados $|\psi_i\rangle$ e $|\psi_f'\rangle$ são ortonormais por construção, de modo que chegamos à expressão para o tempo ótimo T:

$$T_{optimal} = \frac{1}{|\omega|} \arccos \left| \left\langle \psi_f \left| \psi_i \right\rangle \right|$$
 (7.6.3.29);

que é a expressão deduzida por Carlini et al. (2006).

Sabemos, no entanto, que ω tem dimensão de energia; com efeito, por (7.6.3.19), aferimos que a variância de energia é constante e igual a ω^2 : $\left(\Delta \widehat{H}(t)\right)^2 \equiv \left(\Delta E\right)^2 = \omega^2$. Assim, para que (7.6.3.29) faça sentido do ponto de vista dimensional, precisamos introduzir a constante fundamental de ação da Mecânica Quântica - \hbar - de modo que reescreveremos (7.6.3.29) como:

$$T_{optimal} = \frac{\hbar}{\Delta E} \arccos \left| \left\langle \psi_f \middle| \psi_i \right\rangle \right|$$
 (7.6.3.30).

Reconhecemos (7.6.3.30) prontamente como sendo o caso limite, o menor tempo possível, obtido através da Relação de Incerteza Tempo-Energia de Mandelstam-Tamm (MANDELSTAM, TAMM, 1945), que deduzimos no Capítulo anterior:

$$t \ge \frac{\hbar}{\Lambda \hat{H}} \arccos \sqrt{P_t}$$
 (7.6.3.31),

a qual foi obtida, no entanto, sob a hipótese de Hamiltoniano independente do tempo.

Tal resultado é surpreendente pelo fato de as expressões (7.6.3.30) e (7.6.3.31) terem sido obtidas a partir de diferentes premissas e métodos, com diferenças marcantes de ferramental teórico e sofisticação matemática empregados. Ademais, corrobora, de forma cabal, a validade de nossas aproximações de tempo mínimo para transições de estados quânticos, as quais se valeram da hipótese de Hamiltonianos independentes do tempo, no Capítulo 6, e em nosso artigo (LISBOA; PIQUEIRA, 2014a).

Finalmente, podemos escrever o **Fator de Mérito** Associado à "Braquistócrona Quântica" como sendo:

$$\eta_{QB}^{H(t)} \equiv \frac{T_{optimal}}{T_{COS}} = \frac{\hbar \arccos\left|\left\langle \psi_f \left| \psi_i \right\rangle \right|}{\left(\Delta E\right)T_{COS}}$$
(7.6.3.32);

em que, (ΔE) é o desvio padrão de energia; e T_{CQS} é o tempo efetivamente gasto pelo sistema quântico controlado, para efetuar uma dada transferência de estados quânticos, através de algum algoritmo de Controle Ótimo.

8 PERSPECTIVAS DE EMPREGO DAS INTEGRAIS FUNCIONAIS DE FEYNMAN EM CONTROLE QUÂNTICO ÓTIMO

8.1 INTRODUÇÃO

Retomemos a expressão da amplitude de probabilidade de transição entre dois estados quânticos espaço-temporais para uma partícula, em termos da Integral de Trajetória de Feynman:

$$\langle q_F, t_F | q_I, t_I \rangle = \int Dq(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt L(q, \dot{q}, t)\right)$$
 (8.1.1);

ou ainda,

$$\langle x_F, t_F | x_I, t_I \rangle = \int Dx(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t)\right)\right)$$
 (8.1.2);

na qual, mudamos a notação, substituindo as coordenadas generalizadas q e \dot{q} , pelas coordenadas espaciais usuais em um espaço euclideano; e explicitamos os termos da função Lagrangeana L.

A probabilidade associada a essa transição é dada pela seguinte expressão:

$$P_{(x_f,t_f;x_i,t_i)} = \iiint \left| \left\langle x_F, t_F \left| x_I, t_I \right\rangle \right|^2 dx dy dz \qquad (8.1.3);$$

em que o módulo ao quadrado da amplitude tem que ser integrado em todo espaço.

Suponhamos, agora, um potencial da forma V(t) na função lagrangeana de (8.1.1), dependente apenas do tempo. Embora a dedução de 8.1.1 tenha sido feita para

um potencial independente do tempo, dependente apenas das posições, a Integral de Trajetória (8.1.1) continua válida para um potencial também dependente do tempo (SCHULMAN, 2005).

Desejamos um potencial V(t), a ser encarado como um esforço de controle u(t), que seja um extremante da probabilidade (8.1.3). Destarte, somos motivados a formular esse problema nos seguintes termos:

$$\frac{\delta}{\delta V(t)} P_{(x_f, t_f; x_i, t_i)} = \frac{\delta}{\delta V(t)} \iiint \left| \left\langle x_F, t_F \left| x_I, t_I \right\rangle \right|^2 dx dy dz = 0 \quad (8.1.4);$$

na qual tomamos a derivada funcional com respeito ao potencial de controle V(t), impondo-a igual a zero, no afá de conseguir um controle extremante $u^*(t)$ para a função que dá a probabilidade de se encontrar uma dada partícula quântica em um estado espaço-temporal $|x_F,t_F\rangle$, tendo partido de $|x_I,t_I\rangle$.

De forma totalmente explícita, (8.1.4) pode ser escrita da forma:

$$\frac{\delta}{\delta V(t)} P_{(x_f, t_f; x_i, t_i)} = \frac{\delta}{\delta V(t)} \iiint \left| \int Dx(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t)\right) \right) \right|^2 dx dy dz = 0 \quad (8.1.5).$$

Não é nosso propósito resolver, aqui, essa expressão. Com efeito, era nossa intenção apenas formular tal abordagem, a qual se prestaria para atacar problemas de Controle Quântico no espaço das posições (espaço de espectro contínuo).

Naturalmente, há de se aplicar todo um ferramental de técnicas para computar tanto as variações, quanto as integrais de trajetória *per se*.

Felizmente, a literatura que abarca técnicas e métodos computacionais para as integrais de trajetória é muito vasta, haja vista que esse formalismo tem sido extensamente utilizado ao longo das cinco ou seis últimas décadas, em diversos

campos. Podemos citar, por exemplo, (SCHULMAN, 2005), (ZINN-JUSTIN, 2005) e, em particular, (KLEINERT, 2009), o qual é um extenso tratado, com mais de 1600 páginas.

Na Seção a seguir, utilizaremos o formalismo de Integrais de Trajetória para deduzirmos o Efeito Aharonov-Bohm, e, por fim, propormos uma estratégia de Controle Quântico valendo-se desse peculiar efeito quântico.

8.2 O EFEITO AHARONOV-BOHM E PERSPECTIVAS DE USO EM PROBLEMAS DE CONTROLE DE SISTEMAS QUÂNTICOS

Historicamente, o efeito quântico conhecido como "Efeito Aharonov-Bohm" foi previsto inicialmente por Werner Ehrenberg e Raymond E. Siday ao final da década de quarenta. Resultados teóricos similares foram publicados por Yakir Aharonov e David Bohm em um artigo de 1959, o que acabou por associar o nome desses dois últimos pesquisadores ao efeito. Tendo sido confirmado empiricamente pela primeira vez em 1960, e, desde então, amplamente verificado através de inúmeros experimentos, com diversas variações de aparato e condições experimentais, o Efeito Aharonov-Bohm não encontra explicação cabível dentro do arcabouço teórico clássico - trata-se de um efeito puramente quântico, o qual não apenas desafia o senso comum, mas também dá ensejo a discussões de cunho teórico e conceitual de grande profundidade na Física ⁴⁷.

Do ponto de vista fenomenológico, pode ser entendido como uma ação física sofrida por partículas carregadas, devida à existência de um campo magnético, o qual, não obstante, é nulo na região por onde as mesmas excursionam, e na qual suas funções de onda estão definidas. Em outras palavras, ainda que o campo magnético **B** esteja confinado em uma região não acessível às partículas, há um deslocamento de fase das funções de onda das mesmas, alterando suas amplitudes de probabilidade ao longo do espaço.

-

⁴⁷ O Efeito Aharonov-Bohm foi escolhido pela revista *New Scientist* como "uma das sete maravilhas do mundo quântico".

Em sua forma mais comumente descrita e estudada, o efeito Aharonov-Bohm manifesta-se em um tipo de arranjo que podemos apreciar a seguir. Dada uma região dita "Fonte", de onde partem elétrons (ou partículas carregadas quaisquer), coloca-se um anteparo que permite aos elétrons seguir por dois caminhos distintos, de forma semelhante ao célebre problema da dupla fenda. Um solenóide cilíndrico, de comprimento suficientemente grande (idealmente infinito na dimensão z, perpendicular ao plano) é disposto logo atrás do anteparo (ou mesmo atravessando-o), mas a uma certa distância da chamada "Região de Interferência", a qual fisicamente se constitui de um plano ou tela que permite observar a distribuição das partículas, dadas as suas amplitudes de probabilidade (funções de onda). Tal arranjo experimental é ilustrado no diagrama abaixo.

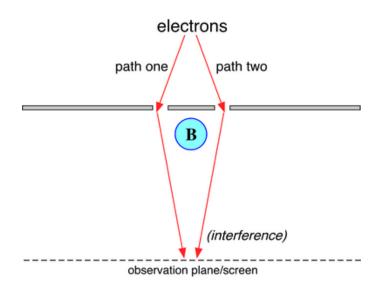


Figura 8.2.1: Diagrama ilustrativo do Efeito Aharonov-Bohm

Voltemo-nos agora para uma descrição matemática do efeito com base no formalismo quântico. Embora esse problema possa ser abordado naturalmente através da equação de Schrödinger na presença ou na ausência do campo $\bf B$, o método de Integrais de Trajetória de Feynman mostra-se particularmente útil e direto para atacar esse problema. Sejam, pois, q_1 e q_N pontos genéricos da região fonte e da região de interferência, respectivamente. Da Mecânica Analítica, sabe-se que a Lagrangiana na

presença de um campo magnético pode ser obtida a partir daquela na ausência do mesmo como se segue:

$$L_{classica}^{0} = \frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^{2} \rightarrow L_{classica}^{0} + \frac{e}{c} \frac{dq}{dt} \cdot \vec{A}$$
 (8.2.1).

A correspondente mudança na Ação para algum segmento suficientemente pequeno de trajetória, indo de $(q_{n-1}; t_{n-1})$ para $(q_n; t_n)$ é então dada por

$$S^{0}(q_{n};q_{n-1}) \rightarrow S^{0}(q_{n};q_{n-1}) + \frac{e}{c} \int_{m-1}^{m} dt \frac{dq}{dt} \cdot \vec{A}$$
 (8.2.2).

Mas a integral da expressão acima pode ser reescrita como

$$\frac{e}{c}\int_{m-1}^{m}dt\frac{dq}{dt}\cdot A = \frac{e}{c}\int_{qn-1}^{qn}\vec{A}\cdot d\vec{r} \qquad (8.2.3),$$

em que $d\vec{r}$ é o elemento diferencial de linha ao longo do segmento de trajetória, de sorte que, quando consideramos a contribuição inteira de q_1 a q_n , temos a seguinte mudança:

$$\prod_{n=1}^{N} \exp\left(\frac{iS^{0}(q_{n}; q_{n-1})}{\hbar}\right) \rightarrow \left[\prod_{n=1}^{N} \exp\left(\frac{iS^{0}(q_{n}; q_{n-1})}{\hbar}\right)\right] \cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{q_{1}}^{q_{N}} \vec{A} \cdot d\vec{r}\right)$$
(8.2.4)

Tudo isso é válido para um caminho particular, como por exemplo o "caminho 2", de modo que precisamos somar ainda sobre todos os caminhos possíveis, o que pode parecer uma tarefa monumental. Afortunadamente, entretanto, sabemos a partir do Eletromagnetismo que a integral de linha $\int \vec{A} \cdot d\vec{r}$ é independente de caminhos (para constatar esse fato, basta aplicar o teorema de Stokes seguido pelo Teorema de

Gauss), isto é, dependente apenas dos pontos finais, desde que um circuito fechado, formado por um par de dois caminhos distintos não envolva um fluxo magnético. Como resultado, as contribuições devidas a **A** ≠ 0 para todos os caminhos indo à direita do solenóide cilíndrico são dadas por um fator de fase em comum. Analogamente, as contribuições de todos os caminhos indo à esquerda do solenóide são multiplicadas por outro fator de fase em comum. Na formulação em termos de integrais de trajetória, temos, então, para transição de amplitude total:

$$\int_{path2} Dq(t) \exp \left(\frac{iS^{0}(q_{N}; q_{1})}{\hbar} \right) + \int_{path1} Dq(t) \exp \left(\frac{iS^{0}(q_{N}; q_{1})}{\hbar} \right) \rightarrow$$

$$\int_{path2} Dq(t) \exp\left(\frac{iS^{0}(q_{N};q_{1})}{\hbar}\right) \cdot \left\{ \exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right) \int_{q_{1}}^{q_{N}} \vec{A} \cdot d\vec{r}\right]_{path2}\right\} +$$

$$\int_{pathl} Dq(t) \exp\left(\frac{iS^{0}(q_{N}; q_{1})}{\hbar}\right) \cdot \left\{ \exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right) \int_{q_{1}}^{q_{N}} \vec{A} \cdot d\vec{r}\right]_{pathl} \right\}$$
(8.2.5).

A probabilidade de encontrar o elétron (ou partícula carregada qualquer) na região de interferência depende do módulo ao quadrado da amplitude de transição total, e, consequentemente, da diferença de fase entre as contribuições dos caminhos 2 e 1.

A diferença de fase devida à presença do campo magnético é, então,

$$\left[\left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \int_{q_1}^{q_N} \vec{A} \cdot d\vec{r} \right]_{path2} - \left[\left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \int_{q_1}^{q_N} \vec{A} \cdot d\vec{r} \right]_{path1} = \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \oint \vec{A} \cdot d\vec{r} =$$

$$= \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \iint_{\Sigma} \nabla \times \vec{A} \cdot \vec{n} dS = \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \iint_{\Sigma} \vec{B} \cdot \vec{n} dS = \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \Phi_{B}$$
 (8.2.6);

em que, Φ_B representa o fluxo magnético dentro do cilindro (solenóide) impenetrável.

Isto significa que, ao mudar a intensidade do campo magnético, há uma componente senoidal na probabilidade de observar a partícula na região de interferência, com período dado por uma unidade fundamental de fluxo magnético, saber (SAKURAI, 1994):

$$\frac{2\pi\hbar c}{|e|} = 4{,}135 \times 10^{-7} \left[Gauss \cdot cm^2 \right]$$
 (8.2.7).

Não é demais enfatizar novamente aqui que esse efeito de interferência discutido é puramente quântico. Com efeito, do ponto de vista clássico, a dinâmica de partículas carregadas é determinada unicamente pela Segunda Lei de Newton combinada à Força de Lorentz. Neste problema, no entanto, além da partícula jamais poder adentrar a região em que **B** é diferente de zero, a força de Lorentz é identicamente nula em todas as regiões nas quais a função de onda da partícula está definida. Não obstante, há um surpreendente padrão de interferência que depende da presença ou ausência de um campo magnético no interior da região cilíndrica impenetrável.

Tal fato físico, teoricamente previsto pela Mecânica Quântica, e comprovado empiricamente incontáveis vezes, valendo-se diferentes arranjos e variações experimentais, levanta a questão de que talvez o potencial vetor **A**, e não campo magnético **B**, seja aquele dotado de uma natureza fundamental, física, e não apenas um mero construto matemático útil para o cálculo de campos magnéticos. Com efeito, a introdução do potencial vetor na dinâmica do sistema, o qual <u>está definido</u> nas regiões por onde as partículas excursionam, parece ter sido responsável pelo fenômeno quântico de interferência aqui discutido. Em contrapartida, pode-se argumentar, no

entanto, que os efeitos observáveis dependem apenas do fluxo magnético Φ , o qual se expressa diretamente em termos do campo **B**.

Por fim, para encerrar essas sucintas digressões conceituais, abertas ao início desta Seção, além de suscitar a questão se os potenciais, tanto $\bf A$ como ϕ , são ou não fundamentalmente físicos, o efeito Aharonov-Bohm lança também luz sobre a discussão do Princípio da Localidade.

Voltemo-nos, agora, para as perspectivas de emprego do Efeito Aharonov-Bohm como estratégia de Controle Quântico (Ótimo).

Dado que, ao provocar uma mudança na intensidade do campo magnético, no interior do solenóide, aparece uma componente senoidal na probabilidade de observar a partícula na região de interferência (SAKURAI, 1994), consideremos, então, a probabilidade de se observar a partícula na região de interferência $P_{Rl}(t)$, em função do tempo, devido à componente senoidal descrita acima, e à luz de (8.2.6) e (8.2.7):

$$P_{RI}(t) = P_0.sen \left[\frac{|e|}{\hbar c} \Phi_B(t) \right]$$
 (8.2.8);

em que, P_0 é a probabilidade de se observar a partícula no anteparo, ou região de interferência, sem a ação do fluxo magnético (variante no tempo), $\Phi_B(t) = \iint_\Sigma \vec{B}(t) \cdot \vec{n} \cdot ds$; e, Σ é a superfície do solenóide cilíndrico impenetrável.

Se considerarmos o campo magnético $\vec{B}(t) = B(t)\hat{u}_z$, e constante em toda superfície (área circular) do solenóide cilíndrico, $\Phi_B(t) = \iint_\Sigma \vec{B}(t).\vec{n}.ds$ reduz-se a $B(t).\pi r^2$.

De posse deste fato, reescrevemos (8.2.8) como:

$$P_{RI}(t) = P_0.sen \left[\frac{|e|}{\hbar c} . \pi r^2 . B(t) \right]$$
 (8.2.9).

Se impusermos que $P_{RI}(t) = 1$, ou seja, queremos maximizar a probabilidade de encontrar a partícula na região de interferência, podemos deduzir de (8.2.9), que o valor do campo B(t) a ser aplicado deve ser:

$$B(t) = \frac{\hbar c}{|e|} \frac{1}{\pi r^2} \arcsin\left(\frac{1}{P_0}\right)$$
 (8.2.10);

na qual, mantemos a dependência temporal do campo B(t) para contemplarmos o caso em que a probabilidade P_0 , de encontrar a partícula na região de interferência, sem a aplicação do campo magnético, possa, eventualmente, também variar com o tempo.

9 CONCLUSÕES

Na presente Tese, procuramos, em primeiro lugar, expor a problemática subjacente ao Controle de Sistemas Quânticos em termos bastante gerais, ressaltando tanto aspectos teóricos, quanto físicos e fenomenológicos.

Na principal metodologia de interesse para este Trabalho, o Controle Quântico Ótimo, após uma exposição minuciosa de sua formulação, incluindo condições de optimalidade, controle ótimo de tempo e métodos numéricos, ilustrando-a com exemplos de aplicações, voltamo-nos à questão, de natureza física, de quais são os menores tempos fisicamente possíveis para que ocorra uma dada transição de estados quânticos. Tal relevante problemática dinâmica permitiu-nos elaborar critérios teóricos e analíticos para a quantificação do desempenho de Sistemas de Controle Quântico de Tempo Mínimo, de importância fundamental para diversas tecnologias quânticas em processo de desenvolvimento, as quais dizem respeito, por exemplo, à Informação Quântica e à Computação Quântica.

Exploramos, inicialmente, a aproximação de Hamiltoniano independente do tempo para avaliar o desempenho de controles quânticos de tempo ótimo, demonstrando que a mesma mostra-se bastante razoável para as abordagens propostas.

Em seguida, conduzimos, no Capítulo seguinte, um extenso estudo teórico, descartando tal hipótese; em outras palavras, formulando o problema para Hamiltonianos Dependentes do tempo, os quais são aqueles que, efetivamente, são empregados em Controle Quântico. Destacamos, entre os desenvolvimentos deste Capítulo, o estudo de caso analítico do Modelo de Landau-Zener, ao que passo que o artigo que o investigava tratava o problema apenas de forma numérica, conforme ressaltamos.

Por fim, ao se estudar o problema da "Braquistócrona Quântica", formulado de maneira complexa, e, valendo-se de um ferramental teórico e matemático elaborado, chegamos à conclusão de que os resultados eram equivalentes ao problema inicialmente formulado, com a aproximação de Hamiltoniano independente do tempo, de modo a corroborar a validade de nossas primeiras aproximações, levadas a cabo no Capítulo anterior.

Como perspectivas de estudos futuros, abertas por este Trabalho, podemos mencionar várias linhas de pesquisa.

No Capítulo 7, Seção 4, por exemplo, as Séries de Dyson, lá definidas e empregadas, apresentam notória semelhança com as Séries de Peano-Baker, que definem as Matrizes de Transição $\Phi(t,\tau)$ utilizadas em Sistemas Lineares Variantes no Tempo (KAILATH, 1980). Um estudo de convergência das mesmas, bem como uma aproximação daquela linguagem de dinâmica quântica com a linguagem de Sistemas Dinâmicos Lineares Variantes no Tempo, poderia ser feito com base no artigo de Baake e Schlägel (2011).

O Controle Quântico de Sistemas de Espectro Contínuo, em particular, o controle espaço-temporal de partículas quânticas, por meio de Integrais de Trajetória de Feynman parece ser uma abordagem bastante promissora, a qual renderia bastante atividade de pesquisa, tanto teórica, como aplicada.

Por fim, o estabelecimento de bases de uma Teoria de Controle Ótimo Quântico-Relativístico, conforme se tenta delinear no Apêndice da presente Tese, constituir-se-ia em uma rica linha de pesquisa, a qual conjugaria a Teoria de Controle Ótimo à Mecânica Quântica Relativística (poderia se pensar, por exemplo, em controlar a Equação de Dirac), e, finalmente, este às Teorias Quânticas de Campo.

Per aspera ad astra!

REFERÊNCIAS

ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. Mineola, NY: Dover Publications, 1965.

ALBERTINI, F.; D'ALESSANDRO, D. The Lie algebra structure and controllability of spin systems. *Linear Algebra and its Applications*, v. 350, p. 213-235, 2002.

ARNOL'D, V. I. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. 2nd Edition. New York: Springer Verlag, 1997.

ASSION, A. et al. Control of chemical reactions by feedback optimized phase-shaped femto second laser pulses. *Science*, v. 282, n. 30, p. 919-922, 1998.

BAAKE, M.; SCHLÄGEL, U. The Peano-Baker Series. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, v. 275, p. 155-159, 2011.

BARUT, O. A. *Electrodynamics and Classical Theory of Fields and Particles*. Mineola, NY: Dover Publications, 1980.

BASDEVANT, J-L.; RICH, J.; SPIRO, M. Fundamentals in Nuclear Physics: From Nuclear Structure to Cosmology. New York: Springer Verlag, 2005 (Advanced Texts in Physics S).

BERGMANN, K.; THEUER, H.; SHORE, B. W. Coherent population transfer among quantum states of atoms and molecules. *Review of Modern Physics*, v. 70, 1003, 1998.

BHATTACHARYYA, K. Quantum decay and the Mandelstam-Tamm time-energy inequality. *Journal of Physics A: Mathematical and General.* v 16, 2993-2996, 1983.

BOOTHBY, W. M. An Introduction to Differentiable Manifolds and Riemannian Geometry. Revised 2nd Edition. San Diego, CA: Academic Press, 2002.

BOSCAIN, U.; CHAMBRION, T.; CHARLOT G. Nonisotropic 3-level Quantum Systems: Complete solutions for minimum time and minimum energy. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* - B, v. 5, n. 4, p. 957 - 990, 2005.

BOUWMEESTER, D.; EKERT, A. K.; ZEILINGER, A. (Ed.). *The Physics of Quantum Information: Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation*. 1st Edition. New York: Springer-Verlag, 2000.

BUCK, R. C. *Advanced Calculus*. 3rd Edition. Long Grove, IL: Waveland Press, Inc. 1978.

BULLO, F.; LEWIS, A. D. Geometric Control of Mechanical Systems: Modeling, Analysis, and Design for Simple Mechanical Control Systems. New York: Springer Verlag, 2004 (Texts in Applied Mathematics).

BUTKOVSKIY, A. G.; SAMOILENKO, Y. I. *Control of Quantum Processes and Systems*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1990.

CANEVA, T. et al. Optimal Control at the Quantum Speed Limit. *Physical Review Letters*. v. 103, n. 124, 240501,1-4, 2009.

CARLINI, A. *et al.* Time-Optimal Quantum Evolution. *Physical Review Letters*. v. 96, n. 124, 240501,1-4, 2006.

CASTRO, A.; GROSS, E. K. U. Acceleration of quantum optimal theory algorithms with mixing strategies. *Physical Review E*, v. 79, 056704, 1-7, 2009.

CIRAC, V. I.; ZOLLER, P. Quantum computation with cold trapped ions. *Physical Review Letters*, v. 74, n. 20, p. 4091-4094, 1995.

COULSTON, G. W.; BERGMANN, K. Population transfer by Stimulated Raman Scattering with delayed pulses: Analytical results for multilevel systems. *Journal of Chemical Physics*, v. 96, p. 3467-3475, 1992.

DAHLEH, M. A.; PEIRCE, A. P.; RABITZ, H. Optimal control of uncertain quantum systems. *Physical Review A*, v. 42, p. 1065-1079, 1990.

D'ALESSANDRO, D.; DAHLEH, M. Optimal control of two level quantum systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 45, n. 1, 2001.

D'ALESSANDRO, D. On quantum state observability and measurement. *Journal of Physics A*: Math. Gen., v.36, p. 9721-9735, 2003.

D'ALESSANDRO, D. Introduction to Quantum Control and Dynamics. Chapman & Hall / CRC, 2007.

DANIELS, R. W. *An introduction to numerical methods and optimization techniques*. New York: North-Holland, 1978.

D'ARIANO, G. M.; PARIS, M. G. A.; SACCHI, M. F. Quantum tomographic methods. *Lecture Notes on Physics*, v. 649, p. 7-58, 2004.

DE FOUQUIERES, P. Implementing Quantum Gates by Optimal Control with Doubly Exponential Convergence. *Physical Review Letters*, v. 108, 110504,1-5, 2012.

DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. 4th Edition. Oxford, UK: Oxford University Press, 1958.

DOHERTY, A. C. *et al.* Quantum feedback control and classical control theory. *Physical Review A*, V. 62, p. 012 105, 2000.

EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*. 2nd Edition. Providence, RI: American Mathematical Society, 2010 (Graduate Studies in Mathematics).

FAHRI, E.; GUTMANN, S. Analog analogue of a digital quantum computation. *Physical Review A.* v. 57, n. 4, 2403-2406, 1998.

FAHRI, E. et al. A Quantum Adiabatic Evolution Algorithm Applied to Random Instances of an NP-Complete Problem. *Science*. v. 292, 472-475, April 2001.

FEYNMAN, R. P. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. *Reviews of Modern Physics*, v. 20, n. 2, April 1948.

FEYNMAN, R. P.; HIBBS, A. R.; STYER, D. F. Quantum Mechanics and Path Integrals: Emended Edition. Mineola, NY: Dover Publications, 2010 (Original Edition: 1965).

FLEMING, W. H.; RISHEL, R. W. Deterministic and Stochastic Optimal Control. New York: Springer Verlag, 1982.

FOLLAND, G. B. Quantum Field Theory: A Tourist Guide for Mathematicians. Providence, RI: American Mathematical Society, 2008.

GELFAND, I. M.; FOMIN, S. V. *Calculus of Variations*. Mineola, NY: Dover Publications, 2000 (Reprint of the 1963 Original Edition).

GILMORE, R. *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications*. Mineola, NY: Dover Publications, 2006 (Reprint of the 1974 Original Edition).

GOLDSTEIN, H.; POOLE, C. P. Jr; SAFKO, J. L. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 3rd Edition, 2001.

GOTTFRIED, K.; YAN, T-M. Quantum Mechanics: Fundamentals. New York: Springer Verlag, 2003.

GREINER, W.; REINHART, J. Field Quantization. New York: Springer Verlag, 1996.

GRIVOPOULOS, S.; BAMIEH. Iterative algorithms for optimal of quantum systems. *Proceedings of the 41st IEEE Conference on Decision and Control*, Las Vegas, Nevada, USA, pp. 2687-2691, December 2002.

GRIVOPOULOS, S.; BAMIEH, B. Lyapunov-based control of quantum systems. *Proceedings of the 42nd Conference on Decision and Control*, Maui, Hawaii, USA, pp. 434-437, Dec. 2003.

GROVER, L. K. Quantum Mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Physical Review Letters*. v. 79, n. 2, 325-328, 1997.

HALL, B. C. *Quantum Theory for Mathematicians*. New York: Springer Verlag, 2013 (Graduate Texts in Mathematics).

HASSANI, S. Mathematical Physics. New York: Springer Verlag, 1999.

HUANG, G. M.; TARN, T. J.; CLARK, J. W. On the controllability of quantum-mechanical systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 24, n. 11, Nov. 1983.

HUNGERFORD, T. W. Algebra. New York: Springer Verlag, 1980.

ISIDORI, A. Nonlinear Control Systems. 3rd Edition. New York: Springer Verlag, 1995.

JACKSON, J. D. *Classical Eletrodynamics*. 3rd Edition. New York: John Wiley & Sons, 1999.

JAEGER, G. *Entanglement, Information, and the Interpretation of Quantum Mechanics*. 1st Edition. New York: Springer Verlag, 2009 (The Frontiers Collection).

JAMES, D. F. V. Quantum dynamics of cold trapped ions with applications to Quantum Computation. *Applied Physics*, v. 66, p. 181-190, 1999.

JOSÉ, J. V.; SALETAN, E. J. Classical Dynamics: A Contemporary Approach. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1998.

JURDJEVIĆ, V. Geometric Control Theory. Cambridge, UK, Cambridge University Press, 1997.

KAILATH, T. Linear Systems. Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1980.

KHANEJA, N.; BROCKETT R.; GLASER S. J. Optimal Control of Spin Systems. *Physics Review A*, v. 63, 032308, 2001.

KHANEJA, N.; GLASER S. J. Cartan Decompostion of SU(n) - Constructive Controllability of Spin Systems and Universal Quantum Computing. *Chemical Physics*, v. 267, n.11, 2001.

KHANEJA, N.; BROCKETT R.; GLASER S. J. Sub-Riemannian Geometry and Time Optimal Control of Three Spin Systems: Coherence Transfer and Quantum Gates. *Physics Review A*, v. 65, 032301, 2002.

KIRK, D. E. *Optimal Control Theory: An Introduction*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1970.

KITAEV, A. Y.; SHEN, A. H.; VYALYI, M. N. *Classical and Quantum Computation*. Providence, RI: American Mathematical Society, 2002. (Graduate Studies in Mathematics).

KLEINERT, H. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets.* 5th Edition. World Scientific Publishing Company, 2008.

KNAPP, A. W. Lie Groups: Beyond an Introduction. 2nd Edtion. Boston: Birkhäuser, 2002.

KOLMOGOROV, A. N.; FOMIN, S. V. *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis*. Mineola, NY: Dover Publications, 1999 (Reprint of the 1961 Edition).

KREYSZIG, E. *Introductory Functional Analysis with Applications*. New York: John Wiley & Sons, 1989.

KROTOV, V. F. Global Methods in Optimal Control Theory. New York: Marcel Dekker, Inc, 1995.

КROTOV, V. F. Управление Квантовыми Системами и Некоторые Идеи Теории Оптимального Управления. *Автоматика и телематика*, № 3, 15-23, 2009.

LAX, P. D. Functional Analysis. 1st Edition. New York: Wiley-Interscience, 2002.

LANG, S. Fundamentals of Differential Geometry. New York: Springer Verlag, 2001 (Graduate Texts in Mathematics v. 191).

LEE, J. M. Manifolds and Differential Geometry. Providence, RI: AMS, 2009.

LEMOS, N. A. *Mecânica Analítica*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2ª Edição, 2007.

LISBOA, A. C.; PIQUEIRA, J. R. C. A Disciplina "Teoria Quântica da Informação": Experiência de Criação e Oferecimento no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da EPUSP. *Anais do XXXIX Congresso Brasileiro de Ensino em Engenharia (COBENGE)*, Blumenau, SC, p. ID 1639, Outubro 2011.

LISBOA, A. C.; PIQUEIRA, J. R. C. Performance Measure for Optimal Quantum Control. *Submitted for Publication: EPJ Quantum Technology*, 2014a.

LISBOA, A. C.; PIQUEIRA, J. R. C. Relativistic Quantum Control Theory. *Submitted for Publication: Mathematical Problems in Engineering*, 2014b.

LLOYD, S. Quantum feedback with weak measurements. *Physical Review. A*, v. 62, p. 012 307, 2000.

LUO, S.L. How fast can a quantum state evolve into a target state? *Physica D.* v. 189, n. 1, 1-7, 2004.

MADAY, Y.; TURICINI, G. New formulations of monotonically convergent quantum control algorithms. *Journal of Chemical Physics*, v. 118, No.18, 8191-8186, 2003.

МАNDELSTAM, L. I.; ТАММ, І. Е. Соотношение Неопределённости Энергия-Время в Нерелятивистской Квантовой Механике. *Извещение Академии Наук СССР* (Серия Физическая) Т. 9, № 1/2, 122-128, 1945.

MELIA, F. *Electrodynamics*. Chicago: Chicago University Press, 2001.

MESSIAH, A. Quantum Mechanics. Two Volumes. North-Holland / New York: John Wiley & Sons, 1966.

MIRRAHIMI, M.; ROUCHON, P. Controlability of quantum harmonic oscillators. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 49, n. 5, May 2004.

MIRRAHIMI, M.; ROUCHON, P.; TURINICI, G. Lyapunov control of bilinear Schrödinger equations. *Automatica*, v. 41, p. 1987-1994, 2005.

MUNKRES, J. R. *Topology*. 2nd Edition. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, Inc., 2000.

NAKAHARA, M. Geometry, Topology and Physics. 2nd Edition. Taylor & Francis, 2003.

NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000.

PFEIFER, P. How Fast Can a Quantum State Change with Time? *Physical Review Letters*. v. 70, n. 22, 3365-3368, 1993.

PIZA, A. F. R. T. Mecânica Quântica. São Paulo: EDUSP, 2002.

PONTRYAGIN, L. S. et al. The Mathematical Theory of Optimal Processes. New York: Interscience Publishers, Inc., 1962.

PUGH, C. C. Real Mathematical Analysis. New York: Springer Verlag, 2003.

RABITZ, H. A.; HSIEH, M. M.; ROSENTHAL, C. M. Quantum optimally controlled transition landscapes. *Science*, v. 303, p. 1998-2001, March 2004. RAMAKRISHNA, V. *et al.* Controlability of molecular systems. *Physical Review A*, v. 51, n. 2, p. 960-966, 1995.

RANGAN, C. et al. Control of trapped-ion quantum states with optical pulses. *Physical Review Letters*, v. 92, n. 11, p. 113004, 2004.

ROLAND, J.; CERF, N. J. Quantum search by local adiabatic evolution. *Physical Review A.* v. 65, 042308, 1-6, March 2002.

ROMAN, S. *Advanced Linear Algebra*. 3rd Edition. Ney York: Spreinger Verlag, 2007 (Graduate Texts in Mathematics).

RUDIN, W. *Principles of Mathematical Analysis*. 3rd Edition, New York: Mc Graw – Hill, 1976.

RUDIN, W. Real and Complex Analysis. 3rd Edition, New York: Mc Graw – Hill, 1987.

RYDER, L. *Quantum Field Theory*. 2nd Edition. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1996.

SAKURAI, J. J. *Advanced Quantum Mechanics*. 10th Printing. Addinson-Wesley Publishing Company, Inc, 1967

SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Revised Edition. Addinson-Wesley Publising Company, Inc, 1994.

SANTORO, G. E. *et al.* Theory of Quantum Annealing of an Ising Spin Glass. *Science*. v. 295, 2427-2430, March 2002.

SCHÄTTLER, H.; LEDZEWICZ, U. Geometric Optimal Control: Theory, Methods and Examples. New York: Springer Verlag, 2012 (Interdisciplinary Applied Mathematics).

SCHIRMER, S. G. *et al.* Degrees of controllability for quantum systems and applications to atomic systems. *Journal of Physics A*, v. 35, p. 4125-4141, 2002.

SCHIRMER, S. G.; De FOUQUIERES, P. Efficient Algorithms for Optimal Control of Quantum Dynamics: The Krotov Method Unencumbered. *New Journal of Physics*. v. 13, 073029 - 1-35, 2011.

SCHULMAN, L. S. *Tecniques and Applications of Path Integration*. Mineola, NY: Dover Publications, 2005 (Reprint of the 1981 Edition).

SHAPIRO, M.; BRUMER, P. Quantum control of chemical reactions. *Journal of Chemical Society, Faraday Trans.*, v. 93, n. 7, p. 1263-1277, 1997.

SHAPIRO, M.; BRUMER, P. *Quantum Control of Molecular Processes.* 1st Edition. New York: John Wiley & Sons, 2002.

SPIVAK, M. *O Cálculo em Variedades*. Rio de Janeiro: Editora Ciência Moderna, 2003 (Tradução de *Calculus on Manifolds*. Westview Press, 1971).

SREDNICKI, M. *Quantum Field Theory*. 1st Edition. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2007.

SUSSMANN, H. J.; WILLEMS, J. C. 300 Years of Optimal Control: From The Brachystochrone to the Maximum Principle. *IEEE Control Systems Magazine (Historical Perspectives)*, v. 17, n. 3, 32-44, June 1997.

TAKHTAJAN, L. A. *Quantum Mechanics for Mathematicians*. Providence, RI: American Mathematical Society, 2008.

VEDRAL, V. Introduction to Quantum Information Science. Oxford, UK: Oxford University Press, 2007.

WEINBERG, S. Lectures on Quantum Mechanics. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2012.

WISEMAN, H. M. Quantum theory of continuous feedback. *Physical Review A*, v. 47, p. 5180-5192, 1993.

WISEMAN, H. M., MILBURN, G. J. *Quantum Measurement and Control.* 1st Edition. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2009.

WU, R.; SOLA, I. R.; RABITZ, H. Optimal quantum control with multi-polarization fields. *Chemical Review Letters*, v. 400, 469-475, 2004.

YANAGISAWA, M.; KIMURA, H. Transfer Function Approach to Quantum Control - Part I: Dynamics of Quantum Feedback Systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 48, n. 12, p. 2107-2120, Dec. 2003.

YANAGISAWA, M.; KIMURA, H. Transfer Function Approach to Quantum Control - Part II: Control Concepts and Applications. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 48, n. 12, p. 2121-2132, Dec. 2003.

ZINN-JUSTIN, J. *Path Integrals in Quantum Mechanics*. Oxford: Oxford University, Press, 2005.

ZEE, A. *Quantum Field Theory in a Nutshell*. 1st Edition. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2003.

ZHU, W.; RABITZ, H. A rapid monotonically convergent iteration algorithm for quantum optimal control over the expectation value of a positive definitive operator. *Journal of Chemical Physics*, 109, No 2, 385-401, 1998.

ZHU, W.; RABITZ, H. Attaining optimal controls for manipulating quantum systems. *International Journal of Quantum Chemistry*, v. 93, p. 50-58, 2003.

APÊNDICE

EM BUSCA DE UMA TEORIA QUÂNTICO-RELATIVÍSTICA DE CONTROLE ÓTIMO

Como Apêndice desta Tese, figura a tentativa de se estabelecer uma Teoria de Controle Quântico Ótimo, a qual seja aplicável no domínio Relativístico. Tal desenvolvimento está atrelado a uma proposta nossa de artigo, cujo texto inicial foi redigido originalmente em Inglês, e submetido ao periódico "*Mathematical Problems in Engineering*" (LISBOA; PIQUEIRA, 2014b) com algumas modificações.

Devemos ressaltar que se trata apenas de um esboço inicial, com o intuito de dar ensejo a estudos posteriores, pesquisas cuidadosas e desenvolvimentos futuros. O texto original segue abaixo.

On the Quantization of Optimal Control Systems when formulated by means of Relativistic Classical Theory of Fields: An approach to a Relativistic Quantum Control Theory

Abstract: In this paper we deal with two distinct problems in order to achieve the main goal proposed. Firstly, it is necessary to establish a precise formulation of Optimal Control Systems in terms of the Classical Field Theory in such a way that the resulting dynamics, as well the constraint relations these systems should obey, must be invariant to Lorentz transformations, i.e., must be expressed in a covariant manner. Once this first goal is fulfilled, we can carry out a quantization procedure of the whole Optimal Control System, which has been made Lorentz-invariant. There are two standard procedures in the Quantum Field Theory one can employ for that, namely the Canonical Quantization and the Path Integral approach. The resulting Optimal Control System is then up to be applied in a control problem involving quantum particles in the relativistic regime and has the inherent advantageous property of allowing, for example, to minimize times, average

distances and/or energy costs of the processes that one desires to control in such a physical domain. A Relativistic Quantum Control Theory could be valuable in enhancing the performance of processes of particles detection and collision, as well in the purpose of promoting, for instance, a controlled anihilation of particles and antiparticles.

Keywords: Quantum Control. Optimal Control. Classical Field Theory. Special Relativity. Covariant Formulation. Quantum Mechanics. Quantization. Canonical Quantization. Path Integrals. Quantum Field Theory. Scalar Field. Dirac Field. Electromagnetic Field. Quantum Electrodynamics.

A1 Basic facts in the Optimal Control Theory

The general optimal control problem which one normaly faces in the conventional Control Theory is to find an admissible control $u^*(t)$ that causes the dynamical system of interest to follow an admissible trajectory $x^*(t)$ that minimizes a certain performance measure or cost functional. We can thus formulate this problem as follows.

Given a set X of state vector-valued functions x(t), with $t \in \Re: \left[t_0, t_f\right]$, $x: \Re \to \Re^n$, and a set U of control functions u(t): $u: \Re \to \Re^m$, find the functions $x \in X$ and $u \in U$ for the dynamical system x = f(x, u(t)), with f being a smooth vector field, which minimize a cost functional $J: X \times U \to \Re$ of the form:

$$J(u) = h(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} g(x(t), u(t), t) dt \quad (1),$$

where h and g are smooth functions depending on the variables x(t), u(t) and on the value of $x(t_f)$, such that $h: \Re^n \times \Re \to \Re$ and $g: \Re^n \times \Re^m \times \Re \to \Re$, respectively, which are judiciously chosen regarding the particular optimal control problem one intends to solve.

The expression (1) defines the so called "Problem of Bolza" in Optimal Control Theory, which comprises the two particular cases, namely the "Problem of Mayer" and the "Problem of Lagrange", corresponding to set g(x(t),u(t)) or $h(x(t_i))$ to zero, respectively. Examples of Mayer problems are minimum time problems, where the control goal is to drive the state to a given target state in minimum time. In this case, the set of admissible controls consists of the ones steering the dynamics in such a way. The Lagrange Problem, in its turn, describes a situation where the control cost accumulates with time. This is the case, for example, when one wants to minimize the energy used during the control action and/or the average distance of the trajectory from a given point. Finally, the Bolza Problem, being a combination of both, arises when there is a cummulative cost which increases during the control action, but special emphasis is placed on the situation at the final time.

A2 Classical Field Theoretic approach to Optimal Control Systems

The expression (1) can be generalized whitin the theoretical framework of Relativistic Classical Fields as follows:

$$I(u(x_{\mu})) = h(\varphi_{\alpha}(B)) + \int_{A}^{B} d^{4}x g(\varphi_{\alpha}(x_{\mu}), u(x_{\mu}), x_{\mu})$$
 (2),

where $x_{\mu} \equiv (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, x, y, z)$ is the space-time covariant four-vector, defined in the Minkowski space (real vector space); A and B the initial and the final event (point) in the four-dimensional space-time, respectively; $h(\varphi_{\alpha}(B))$ the smooth function of Mayer evaluated on $\varphi_{\alpha}(B)$, that is, on the value assumed by the classical field of interest in the spacetime coordinates given by B; $u(x_{\mu})$ the control action now depending explicitly on the spacetime coordinates; $g(\varphi_{\alpha}(x_{\mu}), u(x_{\mu}), x_{\mu})$ the Lagrange function (not to be confused with the Lagrangian or the Lagrangian density of the field), which has

henceforth dependence on x_{μ} , $u(x_{\mu})$ and $\varphi_{\alpha}(x_{\mu})$; and, finally, $I(u(x_{\mu}))$ - the cost functional ⁴⁸ of the control action to be minimized by variational methods.

Insofar as the expression (2) is composed by a (real) scalar function and by a volumetric integral in the spacetime of another (real) scalar quantity (thus Lorentz-invariant by jacobian transformations of coordinates), it results that cost functional $I(u(x_u))$ is also invariant by Lorentz transformations, as one would wish it to be.

Moreover, the proposed functional is as general as possible whitin the Classical Field Theory, so that the field φ_{α} can be taken to be, for example, either the real or complex scalar field, the Dirac field (spinorial field) or the eletromagnetic field, considering that they are adequately formulated in their covariant form.

For the sake of example, and in order to shed light on the optimal control setting by means of Classical Theory of Fields, let us collect here some basic facts and concepts regarding the electromagnetic field in its covariant formulation.

In the Classical Electrodynamics, one defines the following physical entities:

 $A_{\mu} \equiv (\phi, \vec{A}) = (A_0, A_1, A_2, A_3)$: the electromagnetic four-potential;

 $F_{\mu\nu}=\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}$: the *electromagnetic field tensor*, which has the properties of antisymmetry $(F_{\mu\nu}=-F_{\nu\mu})$ and second order (rank 2); moreover, from its matricial representation in terms of the spatial components of $\textbf{\textit{E}}$ and $\textbf{\textit{B}}$, one can derive directly the Maxwell's equations in the covariant form.

Regarding the notation employed to the cost functional defined above, we prefer to use the Latin letter "I" instead of the habitual "J" in order to avoid potential confusion with conserved currents by the fields, which arise naturally as consequence of the Noether's Theorem, e.g., the current four-vector $J\mu$ of the eletromagnetic field.

The electric and the magnetic fields are expressed in terms of the potentials \boldsymbol{A} and $\boldsymbol{\Phi}$ as follows:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \phi$$
;

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$
:

with the covariant gauge condition:

$$A_{\mu}' = A_{\mu} + \partial_{\mu} \Lambda$$
,

which accounts the invariance of A_μ when subjected to such a transformation, given a general smooth scalar function Λ , with $\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ corresponding to the covariant derivative.

The *Lagrangian Density* of the electromagnetic field in the presence of charged particles and currents is given by the expression:

$$\pounds = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{c} J^{\mu} A_{\mu}$$
 (3),

where J^{μ} is the *current four-vector*, with $J^{\mu}=(c\rho,\,J^1\,,\,J^2,\,J^3)$, which satisfies the *covariant continuity equation* $\partial_{\,\mu}J^{\,\mu}=0$.

Therefore, from (3) one can express the *Electromagnetic Action* as:

$$S(A^{\mu}, \partial_{\mu}A^{\mu}) = \int_{A}^{B} d^{4}x \pounds = -\int_{A}^{B} d^{4}x \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{c} J^{\mu} A_{\mu}$$
 (4),

so that, by imposing the first variation of the action equal to zero, $\delta S = 0$, one can obtain after some calculation ⁴⁹ the *movement equation* of the electromagnetic field:

$$\partial_{\mu}F^{\mu\alpha}=\frac{1}{4\pi}J^{\alpha}$$
 (5),

which turns out to be the Maxwell's nonhomogeneous equations in Gaussian unities.

At this point, we should notice two important facts. The classical field φ_{α} that we are dealing with corresponds to A_{μ} , so that action functional S depends on this field and on its space-time derivative $\partial_{\mu}A^{\mu}$. Thus, insofar as we need to define a suitable control action in terms of a four-vector u_{μ} , we can, in principle, to set the time-component of the four-potential A_{μ} , $A_{0} \equiv \phi$, as the time-dependent control action in direct analogy with the conventional u(t) found in the standard Optimal Control Theory. So the electric potential, once made time-dependent, could work as control action over the system dynamics. By the same token, we are, thus, inclined to rewrite the cost functional (2), in this case, as:

$$I(\phi(x_0)) = h(A_{\mu}(B)) + \int_A^B d^4x g(A_{\mu}(x_{\mu}), \phi(x_0), x_{\mu})$$
 (6).

A3 The Quantization of Covariant Optimal Control Systems by means of Canonical Quantization.

In the context of the Non-Relativistic Quantum Mechanics, the Canonical Quantization can be regarded as the process which associates quantities in Classical Mechanics with Hermitian operators in Quantum Mechanics, which operate on the state vectors defined in the Hilbert Space of a given quantum system. Such a process enables the switching from the classical description of a system to the quantum mechanical one, and, as an obvious example, to derive the quantum Hamiltonian from

_

⁴⁹ (Greiner and Reinhardt, 1996; Barut, 1980; Jackson, 1999)

its classical counterpart. For a generic system, defined by means of its classical Lagrangian, one must consider the canonical variables, as well the associated (conjugated) canonical momenta.

Let us record here, for sake of giving a well known example, the transition from the classical to the quantum Hamiltonian for the simple harmonic oscillator:

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$
 (7),

where we notice immediately the appearance of the quantum operators \hat{x} and \hat{p} , position and linear momentum, respectively, in the quantum mechanical description. Moreover, from the Quantum Mechanics, one knows that these operators must obey the canonical commutation relation:

$$\left[\hat{x}_{i},\hat{p}_{j}\right]=i\hbar\delta_{ij}$$
 (8),

expressed here using the Kronecker symbol δ_{ij} , so that $\delta_{ij} = 1$, for i = j, and $\delta_{ij} = 0$ for $i \neq j$.

In the context of the Quantum Field Theory, the generalization of the canonical commutation relation is somewhat straightforward. It is necessary, before proceding further, to define *the canonical momentum density* conjugated to the field $\varphi(\vec{x},t)$:

$$\pi(\vec{x},t) \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}(\vec{x},t)} = \partial_0 \varphi(\vec{x},t) \quad \text{(9)},$$

where *L* stands for the covariant classical Lagrangian, and so that the canonical commutation relation *at equal times* now reads:

$$\left[\pi(\vec{x},t),\varphi(\vec{x}',t)\right] = \left[\partial_0(\vec{x},t),\varphi(\vec{x}',t)\right] = -i\delta^D(\vec{x}-\vec{x}') \quad (10),$$

where $\delta^D(\vec{x}-\vec{x})$ is the D-dimensional Dirac's delta function with respect to two distinct (or not) points in the four-dimensional space-time. Therefore, the conjugated canonical momentum density and the field itself commute only if we are taking into account two different points of the space-time.

Regarding these above defined physical quantities, as well their physical meaning and interpretation, it must be emphatically stressed that the position is no longer an operator, as occured in Quantum Mechanics, but rather a parameter, an argument of the of the quantum field φ , which, so to say, plays the role of the position operator in Quantum Mechanics.

A generic cost functional of Bolza type for a field φ , quantized by means of the canonical quatization procedure, can be written as

$$I(u(\vec{x},t)) = h(\varphi(\vec{x}_F,t_F)) + \int_A^B d^4x g(\varphi(\vec{x},t), u(\vec{x},t), (\vec{x},t))$$
 (11)

taking into consideration that the field $\varphi(\vec{x},t)$ must obey the canonical commutation relation (10); moreover, the control function $u(\vec{x},t)$ could be physically, in priciple, an external field, imposed by an external source.

A4 Formulation of Optimal Control in the Quantum Electrodynamics

The Quantum Electrodynamics (QED) is, mathematically speaking, an abelian (commutative) gauge theory with the symmetry group U(1), that is, the multiplicative group of all complex numbers with absolute value 1, i.e., the unit circle in the complex plane. The gauge field, which mediates the interaction between the charged spin-1/2

fields (electron-positron field), is the electromagnetic field. The QED Lagrangian density for a spin-1/2 field interacting with the electromagnetic field is given (in natural unities $\hbar = c = 1$) by the real part of

$$\pounds = \overline{\psi}(i\gamma^{\mu}D_{\mu} - m)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \quad (12),$$

where γ^{μ} are Dirac matrices;

 ψ is a bispinor field of spin-1/2 particles (e.g. electron-positron field);

 $\overline{\psi} \equiv \psi^{\dagger} \gamma_0$, called "psi-bar", is sometimes referred to as Dirac adjoint;

 $D_{\mu} = \partial_{\mu} + ieA_{\mu} + ieB_{\mu}$ is the gauge covariant derivative;

e is the coupling constant, equal to the electric charge of the bispinor field;

 A_{μ} is the covariant four-potential of the electromagnetic field generated by the electron itself;

 B_{μ} is the external field imposed by external source;

 $F_{\mu\nu}=\partial_{\,\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}$ is the electromagnetic field tensor.

After applying the expression for the gauge covariant derivative D_{μ} into the Lagrangian density (12) one gets

$$\pounds = i \overline{\psi} \gamma^{\mu} \partial_{\mu} \psi - e \overline{\psi} \gamma_{\mu} \left(A^{\mu} + B^{\mu} \right) \psi - m \overline{\psi} \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (13).$$

The new Lagrangian density obtained is up to be inserted into the Euler-Lagrange equation of motion for a covariant field:

$$\partial_{\mu} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_{\mu} \psi)} \right) - \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi} = 0$$
 (14),

which enables one to find the field equations for QED.

After a straightforward calculation, the two terms from this Lagrangian are thus

$$\partial_{\mu} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_{\mu} \psi)} \right) = \partial_{\mu} \left(i \overline{\psi} \gamma^{\mu} \right) ;$$

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi} = -e \, \overline{\psi} \gamma_{\mu} \Big(A^{\mu} + B^{\mu} \Big) - m \, \overline{\psi} \ .$$

Substituting these two terms back into the Euler-Lagrange equation (14), it results in:

$$i\partial_{\mu}\overline{\psi}\gamma^{\mu} + e\,\overline{\psi}\gamma_{\mu}(A^{\mu} + B^{\mu}) + m\,\overline{\psi} = 0$$
 (15),

with the complex conjugate given by:

$$i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi - e\gamma_{\mu}(A^{\mu} + B^{\mu})\psi - m\psi = 0$$
 (16).

Bringing the middle term to the right-hand side transforms this second equation into:

$$i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi - m\psi = e\gamma_{\mu}(A^{\mu} + B^{\mu})\psi$$
 (17).

The left-hand side is like the original Dirac equation for a free particle, and the right-hand side stands for the interaction with the electromagnetic field. The expressions (15) e (17) stand thus for the for equations of motion of the field ψ -bar and ψ , respectively.

One further important equation can be found by substituting the Lagrangian density given by (13) into another Euler-Lagrange equation, this time for the field, A^{μ} :

$$\partial_{\nu} \left(\frac{\partial \mathfrak{t}}{\partial (\partial_{\nu} A_{\mu})} \right) - \frac{\partial \mathfrak{t}}{\partial A_{\mu}} = 0 \quad (18).$$

This time, after carrying out the calculations the two terms are

$$\partial_{\nu} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_{\nu} A_{\mu})} \right) = \partial_{\nu} (\partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\nu} A^{\mu});$$

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial A_{\mu}} = -e\,\overline{\psi}\gamma^{\mu}\psi.$$

and these two terms, when substituted back into (18), give thus the equation of motion to the eletromagnetic field A^{μ}

$$\partial_{\nu}F^{\nu\mu}=e\,\overline{\psi}\gamma^{\mu}\psi\quad \ (19).$$

Now, if one imposes the Lorentz gauge condition, i.e., that the divergence of the four-potential A^{μ} vanishes, in an analog way one founds in Classical Electrodynamics, then it results

$$\partial^{\mu}\partial_{\mu} = e\,\overline{\psi}\gamma^{\mu}\psi \quad (20).$$

Regarding the definition of a cost functional suitable to problems of Optimal Control within the Quantum Electrodynamics (QED), it seems to be natural to write a Bolza type functional of the form:

$$I(B_{\mu}(\vec{x},t)) = h(\psi(\vec{x}_F,t_F)) + \int_A^B d^4x g(\psi(\vec{x},t), A_{\mu}(\vec{x},t), B_{\mu}(\vec{x},t), (\vec{x},t))$$
 (11),

where the h function has dependence on the final state of the ψ field (electron-positron field), as well on the final state itself; and the g function has dependence on the ψ field, on the state (spacetime coordinates) and on the external field B_{μ} due to an external source, so that it could play the role of the control function $u(\vec{x},t)$.