

GLÁUCIA R. PEGLOW BORGES DE CASTRO

**EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK, SUPERSIMETRIA
E ENOVELAMENTO DE PROTEÍNA**

**Tese apresentada para obtenção do título de Doutor em
Biofísica Molecular, Área de Concentração em Biofísica
Molecular. Instituto de Biociências, Letras e Ciências
Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de
Mesquita Filho” - UNESP.**

ORIENTADOR: PROF. DR. ELSO DRIGO FILHO

São José do Rio Preto - SP

2003

*Dedico este trabalho ao Ocimar,
por todo o amor, carinho, paciência e incentivo
sempre presentes neste período tão importante de minha vida .*

Agradecimentos

Ao Professor Elso Drigo Filho; o que dizer de alguém que durante anos se dispôs a aconselhar, cobrar, ajudar, a ORIENTAR, seja como profissional ou amigo e em momentos tranquilos ou difíceis de minha vida. Chego a conclusão de que é impossível dizer em poucas palavras qualquer agradecimento, mas sim seguir minha vida com tudo o que aprendi nestes anos de convivência. Lições otimistas de vida, persistência e muita dedicação em fazer sempre o melhor que puder com muita honestidade e sinceridade.

Aos Professores Augusto Agostinho Neto e Jorge Chahine, pelas discussões e contribuições para a realização deste trabalho e no Exame Geral de Qualificação.

Aos Professores Marcelo Andrés Fossey, Marcio Francisco Colombo, João Ruggiero Neto, Johnny Rizzieri Olivieri, Vitor Barbanti Pereira Leite e Marco Antonio Cândido Ribeiro (in memorian), sempre dispostos a colaborar através de discussões e incentivos para o bom andamento deste projeto.

Ao Professor José Roberto Ruggiero responsável pela preparação do programa utilizado para os cálculos de integração numérica.

Ao professor Álvaro de Souza Dutra pelos resultados fornecidos utilizados para a comparação com os resultados obtidos neste trabalho.

A Professora Maria do Socorro Nogueira Rangel pelas inúmeras leituras e correções que realizou durante a preparação de artigos e pôsteres em inglês.

A Ilva Cecilio Bernardes, Paulo Roberto Salinas, Antônio Aparecido Barbosa e Rosinei Prates Berti agradeço pela disposição que sempre tiveram para ajudar em qualquer situação, sem nunca medirem nenhum esforço para tal.

Aos amigos Alexandre Neves, Alexandre Teso, Tereza, Flávio, Fábio, Neide, Ceci, Valmir, Renato, Fernanda, Priscila, Giovanni, Luciana, Sidney, Márcia pelo companheirismo e amizade que sempre tiveram.

Aos amigos Maruza e Osmar, Sabrina e João Carlos, Janaína e Gerson, Bernadete e Márcio, Andressa e Fábio, Elso e Socorro, agradeço por permitirem que eu fizesse parte de suas vidas, pelo apoio, carinho e incentivo sempre presentes durante a realização deste projeto muito desejado e também por participarem de momentos importantes de minha vida.

A Fátima que durante os últimos dez anos me mostrou, dentre muitas coisas, que dificuldades existem para serem vencidas e tomadas sempre como uma experiência boa para ser lembrada em nosso futuro.

A Nadir que com toda a sua experiência, sabedoria e sensibilidade sempre soube o que dizer e como dizer. Em muitos momentos me fazendo refletir e com certeza procurar uma melhor maneira de lidar com esta grande arte que é viver.

A todos os professores que passaram por minha vida, e que também são responsáveis por esta conquista.

Agradeço a todas as pessoas que de maneira direta ou indireta contribuíram para que este trabalho fosse realizado da melhor maneira possível.

"...Se eu pudesse deixar algum presente a você, deixaria aceso o sentimento de amor à vida dos seres humanos. A consciência de aprender tudo o que nos foi ensinado pelo tempo afora. Lembraria os erros que foram cometidos, como sinais para que não mais se repetissem. A capacidade de escolher novos rumos. Deixaria para você, se pudesse, o respeito àquilo que é indispensável: além do pão, o trabalho e a ação. E, quando tudo mais faltasse, para você eu deixaria, se pudesse, um segredo. O de buscar no interior de si mesmo a resposta para encontrar a saída."

(Mahatma Ghandi)

Aos meus pais João e Loni, que sempre tiveram a preocupação de como educar um filho único. Ensinaram desde muito cedo que para qualquer realização seria necessário muita dedicação, trabalho e força de vontade. Agradeço pelo amor, carinho e respeito que sempre tiveram e por confiarem em mim e em minhas decisões. Tivemos muitas dificuldades, mas vencemos juntos.

*"...E cada verso meu será
Pra te dizer, que eu sei que vou te amar,
Por toda a minha vida..."*

(Tom Jobim e Vinícius de Moraes)

Ao Ocimar que um dia passou a fazer parte da minha vida, do meu despertar, do meu adormecer e de todos os meus sonhos. Agradeço por tudo o que fez para que eu pudesse realizar este trabalho com toda a minha dedicação e amor.

Agradeço a Deus pela vida e por mais esta etapa concluída.

*Agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado
de São Paulo - **FAPESP** - pelo apoio financeiro.*

“...Herdamos de nossos antepassados um profundo desejo por um conhecimento unificado e abrangente...

...Mas o alargamento nos singulares últimos cem anos das múltiplas ramificações do conhecimento, tanto em extensão quanto em profundidade, confrontou-nos com um difícil dilema. Sentimos claramente que só agora começamos a adquirir material confiável para reunir tudo o que se sabe em uma só totalidade.

Mas, por outro lado, tornou-se quase impossível para uma só mente dominar por completo mais que uma pequena porção especializada desse conhecimento...”

(Erwin Schrödinger, 1944)

“Não devemos nos sentir desencorajados pela dificuldade de interpretar a vida a partir das leis comuns da física.”

(Erwin Schrödinger)

ÍNDICE

RESUMO	01
ABSTRACT	02
I. INTRODUÇÃO	03
II. EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E SUPERSIMETRIA	06
2.1 – Formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica	06
2.2 – Aplicação do Formalismo Supersimétrico ao Potencial	
$V(x) = -\gamma x^2 + x^4$	14
III. EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER ASSOCIADA	22
IV. ANÁLISE DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA UM POTENCIAL BIESTÁVEL SIMÉTRICO	26
V. ANÁLISE DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA UM POTENCIAL BIESTÁVEL ASSIMÉTRICO	36
VI. ENOVELAMENTO DE PROTEÍNA	44
VII. DISCUSSÃO E CONCLUSÃO	62
VIII. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	68

APÊNDICE I	71
I.1- Procedimento para a Minimização do Primeiro Nível de Energia e Comparação Gráfica para os Potenciais	71
I.2- Procedimento para a Minimização do Segundo Nível de Energia e Comparação Gráfica para os Potenciais	75
I.3- Rotina Utilizada para os Cálculos de Integração Numérica	78
APÊNDICE II	80
APÊNDICE III	102
APÊNDICE IV	116
APÊNDICE V	123
V.1- Procedimento Utilizado para o Cálculo da Probabilidade de Transição e Probabilidade Total para $D = 0,5$	123
V.2- Resultados Obtidos para os Autovalores de Energia, Probabilidade de Transição e Probabilidade Total para Vários Valores de D	139

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1: Gráfico para o potencial (2.28) com $\gamma = 0,5$.	14
Figura 4.1: Gráfico para o potencial dado em (4.1).	26
Figura 4.2: Gráfico para o potencial dado em (4.2).	27
Figura 4.3: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição para um potencial biestável simétrico.	34
Figura 5.1: Gráfico para o potencial dado em (5.1).	36
Figura 5.2: Gráfico para o potencial dado em (5.2).	37
Figura 5.3: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição para um potencial biestável assimétrico.	43
Figura 6.1: Gráfico para o potencial de Fokker-Planck $U(x)$.	48
Figura 6.2: Gráfico para o potencial de Schrödinger.	49
Figura 6.3: Comparação gráfica dos potenciais $V_{1,+}(x)$ e $V_{2,-}(x)$.	52
Figura 6.4: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,5$ para $t = 1$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.	54
Figura 6.5: Gráfico das probabilidades totais para $D = 0,5$.	55
Figura 6.6: Relação entre os tempos t_{50} e os coeficientes de difusão.	58
Figura 6.7: Relação entre as probabilidades totais para o estado envelado e os coeficientes de difusão.	59

Figura 6.8: Comparação entre os gráficos para as probabilidades totais para o estado enovelado com vários valores para o coeficiente de difusão.	59
Figura 6.9: Probabilidade total para o estado desenovelado variando o coeficiente de difusão.	61
Figura I.1: Gráfico para a comparação entre os potenciais original e efetivo.	74
Figura I.2: Gráfico para a comparação entre os potenciais.	77
Figura II.1: Gráfico para a função de onda no estado fundamental.	81
Figura II.2: Gráfico para a função de onda no primeiro estado excitado.	86
Figura II.3: Gráfico para a função de onda no segundo estado excitado.	88
Figura II.4: Gráfico para a função de onda no terceiro estado excitado.	89
Figura II.5: Gráfico para a função de onda no quarto estado excitado.	91
Figura II.6: Gráfico para a função de onda no quinto estado excitado.	92
Figura II.7: Gráfico para a função de onda no sexto estado excitado.	94

Figura II.8: Gráfico para a função de onda no sétimo estado excitado.	95
Figura II.9: Gráfico para a função de onda no oitavo estado excitado.	97
Figura II.10: Gráfico para a probabilidade de transição.	101
Figura III.1: Gráfico para a função de onda no estado fundamental.	103
Figura III.2: Gráfico para a função de onda no primeiro estado excitado.	107
Figura III.3: Gráfico para a função de onda no segundo estado excitado.	108
Figura III.4: Gráfico para a função de onda no terceiro estado excitado.	109
Figura III.5: Gráfico para a função de onda no quarto estado excitado.	110
Figura III.6: Gráfico para a função de onda no quinto estado excitado.	111
Figura III.7: Gráfico para a função de onda no sexto estado excitado.	112
Figura III.8: Gráfico para a probabilidade de transição.	115
Figura IV.1: Estrutura que representa o esquema geral para os aminoácidos.	116

Figura IV.2: Ilustração de uma α -hélice característica.	120
Figura IV.3: Ilustração de uma folha- β característica.	120
Figura IV.4: Ilustração da estrutura terciária da lipase.	121
Figura IV.5: Ilustração do encaixe induzido enzima-substrato, entre a lisozima e o ácido N-acetilmurâmico e N-acetilglicosamina.	122
Figura V.1: Gráfico para a função de onda no estado fundamental.	124
Figura V.2: Gráfico para a função de onda no primeiro estado excitado.	128
Figura V.3: Gráfico para a função de onda no segundo estado excitado.	129
Figura V.4: Gráfico para a função de onda no terceiro estado excitado.	130
Figura V.5: Gráfico para a função de onda no quarto estado excitado.	131
Figura V.6: Gráfico para a função de onda no quinto estado excitado.	132
Figura V.7: Gráfico para a função de onda no sexto estado excitado.	133
Figura V.8: Gráfico para a probabilidade de transição.	136
Figura V.9: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para os estados enovelado e desenovelado.	138

Figura V.10: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,3$ para $t = 2,3$, $t = 3$, $t = 5$ e $t = 10$.	139
Figura V.11: Gráfico das probabilidades totais para $D = 0,3$.	139
Figura V.12: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,4$ para $t = 1,45$, $t = 3$, $t = 3,5$ e $t = 10$.	140
Figura V.13: Gráfico das probabilidades totais para $D = 0,4$.	140
Figura V.14: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,6$ para $t = 0,8$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.	141
Figura V.15: Gráfico das probabilidades totais para $D = 0,6$.	141
Figura V.16: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,8$ para $t = 0,6$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.	142
Figura V.17: Gráfico das probabilidades totais para $D = 0,8$.	142
Figura V.18: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1$ para $t = 0,45$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.	143
Figura V.19: Gráfico das probabilidades totais para $D = 1$.	143
Figura V.20: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1,2$ para $t = 0,4$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.	144
Figura V.21: Gráfico das probabilidades totais para $D = 1,2$.	144
Figura V.22: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1,4$ para $t = 0,32$, $t = 1,5$, $t = 2,5$ e $t = 10$.	145
Figura V.23: Gráfico das probabilidades totais para $D = 1,4$.	145

Figura V.24: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1,6$ para $t = 0,3$, $t = 0,8$, $t = 1,5$ e $t = 10$.	146
Figura V.25: Gráfico das probabilidades totais para $D = 1,6$.	146
Figura V.26: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1,8$ para $t = 0,25$, $t = 0,8$, $t = 1,5$ e $t = 10$.	147
Figura V.27: Gráfico das probabilidades totais para $D = 1,8$.	147
Figura V.28: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 2$ para $t = 0,2$, $t = 0,8$, $t = 1,5$ e $t = 10$.	148
Figura V.29: Gráfico das probabilidades totais para $D = 2$.	148
Figura V.30: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 5$ para $t = 0,1$, $t = 0,3$, $t = 0,8$ e $t = 10$.	149
Figura V.31: Gráfico das probabilidades totais para $D = 5$.	149
Figura V.32: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 10$ para $t = 0,05$, $t = 0,1$, $t = 0,5$ e $t = 10$.	150
Figura V.33: Gráfico das probabilidades totais para $D = 10$.	150

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1: Representação da hierarquia de Hamiltonianos.	11
Tabela 2.2: Esquema para a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos.	13
Tabela 2.3: Resultados para os autovalores de energia $E_0(V)$ e $E_1(V)$ para o potencial dado em (2.28) com valores diferentes de γ .	19
Tabela 2.4: Resultados para os autovalores de energia $E_2(V)$ e $E_3(V)$ para o potencial dado em (2.28) com valores diferentes de γ .	20
Tabela 4.1: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros variacionais minimizados. Autovalores encontrados através do método SDD (ES_n) e através da integração numérica (EI_n).	32
Tabela 5.1: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros variacionais minimizados. Autovalores encontrados através do método SDD (ES_n).	41
Tabela 6.1: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros variacionais minimizados para $D = 0,5$.	53
Tabela 6.2: Resultados para t_{50} e N_{enov} para vários valores de D .	57

Tabela IV.1: Classificação dos aminoácidos quanto à cadeia lateral.	118
Tabela V.1: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,3$.	139
Tabela V.2: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,4$.	140
Tabela V.3: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,6$.	141
Tabela V.4: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,8$.	142
Tabela V.5: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1$.	143
Tabela V.6: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1,2$.	144

Tabela V.7: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1,4$.	145
Tabela V.8: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1,6$.	146
Tabela V.9: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1,8$.	147
Tabela V.10: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 2$.	148
Tabela V.11: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 5$.	149
Tabela V.12: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 10$.	150

RESUMO

Neste trabalho a equação de Schrödinger associada a equação de Fokker-Planck é estudada através do formalismo de supersimetria. O procedimento usado é buscar a função de onda através da determinação do superpotencial. Quando esta função não pode ser determinada exatamente, procuram-se soluções aproximadas que podem ser usadas no método variacional. Através do formalismo supersimétrico é possível construir uma hierarquia de Hamiltonianos efetivos, e deste modo determinar as autofunções aproximadas e os autovalores variacionais. A equação de Fokker-Planck é analisada envolvendo dois potenciais biestáveis unidimensionais, um simétrico e outro assimétrico. Os resultados obtidos são comparados com aqueles encontrados por outros métodos. Finalmente, um potencial com características adequadas para o estudo do enovelamento de proteína é analisado. As funções de onda e os autovalores de energia obtidos variacionalmente são utilizados para o cálculo da probabilidade de transição. Algumas quantidades dinâmicas do processo são descritas.

ABSTRACT

In this work the Schrödinger and Fokker-Planck equation are studied through the supersymmetric formalism. The method introduced here is based on an ansatz for the superpotential and it gives the analytical wave function. When this function cannot be determined exactly the formalism supplies a trial function to be used in the variational method. Using the supersymmetric formalism it is possible to build an effective hierarchy of Hamiltonians, then for a given potential, the approximated eigenfunctions and variational eigenvalues are determined. We analyze the Fokker-Planck equation with two one-dimensional bistable potential, symmetric and asymmetric. The results are compared with the values found by others methods. Finally, a potential with characteristics adapted for the study of the protein folding is analyzed. The wave functions and the eigenvalues of energy are used for the calculation of the transition probability. Some dynamic variables used in the description of the process are discussed.

INTRODUÇÃO

I. INTRODUÇÃO

A equação de Fokker-Planck possui uma ampla aplicação em muitos ramos da física, química e biologia. Em particular, processos que envolvem difusão, transferência de elétrons, transferência de prótons e enovelamento de proteína podem ser tratados através desta equação. Esta equação pode ser relacionada com a equação de Schrödinger através de mudanças apropriadas nas funções envolvidas (Tomé & Oliveira, 2001; Risken, 1989). Deste modo, o estudo da equação de Schrödinger resultante nos possibilita analisar as soluções da equação de Fokker-Planck e obter informações sobre o sistema de interesse. Assim, métodos usados para a resolução da equação de Schrödinger podem ser úteis na resolução da equação de Fokker-Planck, por exemplo, método variacional (Bernstein & Brown, 1984) e diagonalização de estados dependentes (So & Liu, 2000), além da integração numérica da equação (Jun & Weaver, 2002).

Neste trabalho a equação de Schrödinger associada à equação de Fokker-Planck é estudada através do formalismo de supersimetria (Cooper *et al.*, 2001; Borges & Drigo, 1999; Junker, 1996). O procedimento usado é buscar a função de onda através da determinação do superpotencial. Quando esta função não pode ser determinada exatamente, procuram-se soluções aproximadas que podem ser usadas no método variacional (Borges & Drigo, 2001; Drigo & Ricotta, 2000; Borges, 1999; Drigo & Ricotta, 1995) para a obtenção dos autovalores para o

potencial de interesse. Através do formalismo supersimétrico é possível construir uma hierarquia de Hamiltonianos efetivos, e deste modo determinar variacionalmente os autovalores para os estados excitados.

Por outro lado, um dos problemas mais envolventes da biofísica atual, o enovelamento de proteína (Onuchic *et al.*, 1997), pode ser tratado usando a equação de Fokker-Planck. O formalismo desenvolvido permite encontrar uma solução aproximada, porém analítica, para um potencial típico usado neste estudo.

No desenvolvimento do método proposto, inicialmente os autovalores da equação de Schrödinger são determinados para os quatro primeiros níveis do potencial $V(x) = -\gamma x^2 + x^4$ (Keung *et al.*, 1988) (Capítulo II). Neste caso são comparados os resultados obtidos pelo formalismo supersimétrico e método variacional com resultados obtidos pela integração numérica. Os resultados atestam a eficiência do método nos cálculos envolvendo níveis excitados.

Após estabelecer a relação entre as equações de Schrödinger e Fokker-Planck (Capítulo III) é analisada a equação de Fokker-Planck com um potencial biestável, simétrico e unidimensional (So & Liu, 2000). As autofunções obtidas através da supersimetria e os autovalores encontrados através do método variacional, são utilizados para calcular a probabilidade de transição (Risken, 1989). Os resultados obtidos para os autovalores de energia e para o cálculo da probabilidade de transição para quatro valores de tempos diferentes, são comparados com os valores encontrados pelo método de diagonalização de estados dependentes (SDD)

(So & Liu, 2000). Os autovalores também foram comparados com autovalores obtidos diretamente por integração numérica (Capítulo IV).

Continuando o desenvolvimento do formalismo, é estudado um potencial biestável, assimétrico e unidimensional. Novamente, as funções de onda e os autovalores encontrados são utilizados para calcular a probabilidade de transição (Capítulo V). Os resultados obtidos são comparados com aqueles encontrados pelo método de diagonalização de estados dependentes.

Uma vez consolidado o formalismo, foi tratado um potencial com características adequadas para o estudo do enovelamento de proteína. Seguindo a abordagem desenvolvida, o potencial é utilizado na equação de Fokker-Planck e transformado em um potencial a ser utilizado na equação de Schrödinger. Soluções aproximadas desta equação são encontradas através da supersimetria e método variacional. As funções de onda e os autovalores de energia obtidos variacionalmente são utilizados para o cálculo da probabilidade de transição (Capítulo VI). É feito um estudo das soluções obtidas para vários valores do coeficiente de difusão enfocando a dinâmica do sistema.

**EQUAÇÃO DE
SCHRÖDINGER E SUPERSIMETRIA**

II. EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E SUPERSIMETRIA

2.1- Formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica

No formalismo usual da Mecânica Quântica Supersimétrica temos dois geradores Q e Q^+ que obedecem à relação de anticomutação:

$$\{Q, Q^+\} = H_{ss} \quad , \quad \{Q, Q\} = \{Q^+, Q^+\} = 0 \quad (2.1)$$

onde

$$Q = a^- \sigma^- \quad e \quad Q^+ = a^+ \sigma^+ \quad (2.2)$$

sendo a^\pm operadores bosônicos e σ^\pm operadores fermiônicos que podem ser escritos em termos das matrizes de Pauli (Cohen-Tannoudji *et al.*, 1977)

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ e $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, da seguinte maneira:

$$\sigma^- = \frac{1}{2} [\sigma_x - i\sigma_y] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad e \quad \sigma^+ = \frac{1}{2} [\sigma_x + i\sigma_y] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Uma vez que os operadores a^\pm comutam com σ^\pm , ($\{a^+, \sigma^+\} = \{a^+, \sigma^-\} = \{a^-, \sigma^-\} = \{a^-, \sigma^+\} = 0$) a anticomutação em (2.1) pode ser escrita:

$$\{Q, Q^+\} = a^- \sigma^- a^+ \sigma^+ + a^+ \sigma^+ a^- \sigma^- = a^- a^+ \sigma^- \sigma^+ + a^+ a^- \sigma^+ \sigma^- \quad (2.4)$$

onde

$$\sigma^- \sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$\sigma^+ \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Portanto:

$$\mathbf{H}_{ss} = \{Q, Q^+\} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{a}^- \mathbf{a}^+ \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Esse Hamiltoniano pode ser escrito em termos de dois Hamiltonianos H_+ e H_- que são chamados companheiros supersimétricos,

$$\mathbf{H}_{ss} = \begin{pmatrix} H_+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & H_- \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Desta estrutura é possível construir novos Hamiltonianos com relações simples entre suas autofunções e autovalores.

Através do formalismo de supersimetria em Mecânica Quântica (Cooper *et al.*, 2001; Borges & Drigo, 1999) pode-se desenvolver um método para determinação dos autovalores de energia, onde a solução da equação de Schrödinger pode ser obtida estado por estado através da chamada hierarquia de Hamiltonianos.

O método em questão pode ser introduzido a partir de um dado Hamiltoniano H_0 da forma:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x). \quad (2.9)$$

Pode-se escrever este Hamiltoniano em termos dos operadores bosônicos,

$$\mathbf{a}_1^\pm = \mp \frac{d}{dx} + w_1(x), \quad (2.10)$$

onde $w_1(x)$ é chamado de superpotencial e para simplificar a notação, adotou-se $\hbar = 2m = 1$. Assim, $H_{1,-}$ pode ser escrito da forma:

$$H_{1,-} = \mathbf{a}_1^+ \mathbf{a}_1^- + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (2.11)$$

Portanto, o Hamiltoniano é escrito em termos dos operadores a_1^+ e a_1^- , ou seja, o Hamiltoniano está fatorizado. O fator constante $E_0^{(1)}$ foi adicionado de forma a assegurar que o Hamiltoniano original tenha primeiro estado com autovalor zero.

Para que o Hamiltoniano fatorizado (2.11) seja igual ao Hamiltoniano original (2.9), a seguinte condição (equação de Riccati) tem que ser verdadeira:

$$w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = V_0(x). \quad (2.12)$$

Desta equação observa-se que o valor de $E_0^{(1)}$ será dado pelos termos que não dependerem de x .

O companheiro supersimétrico de $H_{1,-}$ é construído invertendo-se a ordem dos operadores bosônicos

$$H_{1,+} = a_1^- a_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}, \quad (2.13)$$

onde tem-se o seguinte potencial:

$$V_{1,+}(x) = w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (2.14)$$

Entretanto, se $H_{2,-}$ puder ser fatorizado outra vez em termos de novos operadores bosônicos da forma,

$$H_{2,-} = a_2^+ a_2^- + E_0^{(2)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} \quad (2.15)$$

sendo, os operadores escritos como,

$$a_2^\pm = \mp \frac{d}{dx} + w_2(x) \quad (2.16)$$

então $w_2(x)$ deve satisfazer uma equação igual a (2.12) com um novo potencial dado por:

$$V_{2,-}(x) = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} \quad (2.17)$$

que deve ser igual a $V_{1,+}(x)$ a menos da constante aditiva.

Este processo pode ser repetido n vezes, desde que os Hamiltonianos sucessivos possam ser fatorizados, o que gera toda uma família de Hamiltonianos cujos membros estão relacionados pela supersimetria. Neste caso tem-se a seguinte forma geral:

$$H_{n,-} = a_n^+ a_n^- + E_0^{(n)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_n^2(x) - w_n'(x) + E_0^{(n)}, \quad (2.18)$$

$$a_n^\pm = \mp \frac{d}{dx} + w_n(x), \quad (2.19)$$

onde

$$V_{n,-}(x) = w_n^2(x) - w_n'(x) + E_0^{(n)}. \quad (2.20)$$

Por outro lado, o superpotencial está ligado a autofunção do estado fundamental. Esta relação pode ser obtida aplicando o operador a_1^- , equação (2.10), na função de onda do estado fundamental:

$$a_1^- \Psi_0^{(1)}(x) = 0. \quad (2.21)$$

Assim,

$$\Psi_0^{(1)}(x) \propto e^{-\int w_1(x).dx}. \quad (2.22)$$

Então, basta determinar o superpotencial $w_1(x)$ para chegar a função de onda para o estado fundamental. Pode-se achar também a função de onda para o primeiro estado excitado $\Psi_1^{(1)}(x)$ através do operador a_1^+ aplicado em $\Psi_0^{(2)}(x)$ que neste caso é a função de onda no estado fundamental para o segundo Hamiltoniano. Esta relação pode ser estendida para todos os membros da hierarquia, desse modo, chega-se a uma forma geral para as autofunções aplicando sucessivas vezes os operadores (Drigo, 1997):

$$\Psi_n^{(1)}(x) = a_1^+ a_2^+ \dots \Psi_0^{(n+1)}(x), \quad (2.23)$$

$$\Psi_0^{(n)}(x) = N \exp \left\{ - \int_0^x w_n(\bar{x}) d\bar{x} \right\}. \quad (2.24)$$

A supersimetria permite encontrar a solução do problema original H_0 através das relações entre os estados fundamentais de cada membro da família. A igualdade neste caso deve ser entendida a menos da normalização.

Portanto, uma vez que autovalores e autofunções são conhecidos para um dos membros da hierarquia de Hamiltonianos é possível determiná-los para todos os Hamiltonianos através da superálgebra. Apenas os potenciais exatamente solúveis permitem a construção da superfamília completa. A Tabela 2.1 ilustra este resultado.

$\Psi_0^{(1)} = a_1^+ \Psi_7^{(2)}$	$\Psi_7^{(2)} = a_2^+ \Psi_6^{(3)}$	$\Psi_6^{(3)} = a_3^+ \Psi_5^{(4)}$	$\Psi_5^{(4)} = a_4^+ \Psi_4^{(5)}$	$\Psi_4^{(5)} = a_5^+ \Psi_3^{(6)}$	$\Psi_3^{(6)} = a_6^+ \Psi_2^{(7)}$	$\Psi_2^{(7)} = a_7^+ \Psi_1^{(8)}$	$\Psi_1^{(8)} = a_8^+ \Psi_0^{(9)}$	$\Psi_0^{(9)}$
$\Psi_7^{(1)} = a_1^+ \Psi_6^{(2)}$	$\Psi_6^{(2)} = a_2^+ \Psi_5^{(3)}$	$\Psi_5^{(3)} = a_3^+ \Psi_4^{(4)}$	$\Psi_4^{(4)} = a_4^+ \Psi_3^{(5)}$	$\Psi_3^{(5)} = a_5^+ \Psi_2^{(6)}$	$\Psi_2^{(6)} = a_6^+ \Psi_1^{(7)}$	$\Psi_1^{(7)} = a_7^+ \Psi_0^{(8)}$	$\Psi_0^{(8)}$	
$\Psi_6^{(1)} = a_1^+ \Psi_5^{(2)}$	$\Psi_5^{(2)} = a_2^+ \Psi_4^{(3)}$	$\Psi_4^{(3)} = a_3^+ \Psi_3^{(4)}$	$\Psi_3^{(4)} = a_4^+ \Psi_2^{(5)}$	$\Psi_2^{(5)} = a_5^+ \Psi_1^{(6)}$	$\Psi_1^{(6)} = a_6^+ \Psi_0^{(7)}$	$\Psi_0^{(7)}$		
$\Psi_5^{(1)} = a_1^+ \Psi_4^{(2)}$	$\Psi_4^{(2)} = a_2^+ \Psi_3^{(3)}$	$\Psi_3^{(3)} = a_3^+ \Psi_2^{(4)}$	$\Psi_2^{(4)} = a_4^+ \Psi_1^{(5)}$	$\Psi_1^{(5)} = a_5^+ \Psi_0^{(6)}$	$\Psi_0^{(6)}$			
$\Psi_4^{(1)} = a_1^+ \Psi_3^{(2)}$	$\Psi_3^{(2)} = a_2^+ \Psi_2^{(3)}$	$\Psi_2^{(3)} = a_3^+ \Psi_1^{(4)}$	$\Psi_1^{(4)} = a_4^+ \Psi_0^{(5)}$	$\Psi_0^{(5)}$				
$\Psi_3^{(1)} = a_1^+ \Psi_2^{(2)}$	$\Psi_2^{(2)} = a_2^+ \Psi_1^{(3)}$	$\Psi_1^{(3)} = a_3^+ \Psi_0^{(4)}$	$\Psi_0^{(4)}$					
$\Psi_2^{(1)} = a_1^+ \Psi_1^{(2)}$	$\Psi_1^{(2)} = a_2^+ \Psi_0^{(3)}$	$\Psi_0^{(3)}$						
$\Psi_1^{(1)} = a_1^+ \Psi_0^{(2)}$	$\Psi_0^{(2)}$							
$\Psi_0^{(1)}$								
$H_1 + E_0(1)$	$H_2 + E_0(2)$	$H_3 + E_0(3)$	$H_4 + E_0(4)$	$H_5 + E_0(5)$	$H_6 + E_0(6)$	$H_7 + E_0(7)$	$H_8 + E_0(8)$	$H_9 + E_0(9)$

Tabela 2.1:
Representação da
hierarquia de
Hamiltonianos e
da relação entre
as autofunções e
autovalores de
energia obtidos
através da
supersimetria.

Quando não for possível a determinação analítica exata do superpotencial pode-se procurar uma forma aproximada ($w_{ef}(x)$) para ele (Drigo & Ricotta, 1995). Este tipo de abordagem permite encontrar funções analíticas, embora não exatas, para as autofunções do problema original

$$\Psi_{ef}(x) = e^{-\int w_{ef}(x).dx}, \quad (2.25)$$

e também fornece os potenciais efetivos

$$V_{ef}(x) = w_{ef}^2(x) - w_{ef}'(x), \quad (2.26)$$

que podem ser usados para a comparação gráfica com o potencial original, testando assim a forma escolhida para o superpotencial (Borges & Drigo, 2001). Na Tabela 2.2 está o esquema para a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos.

As autofunções obtidas podem ser usadas no método variacional (Gasiorowicz, 1996) para a obtenção aproximada dos níveis de energia através da expressão:

$$E = \frac{\int \Psi_{\{\mu\}}(x) H \Psi_{\{\mu\}}(x) dx}{\int \Psi_{\{\mu\}}^2(x)}. \quad (2.27)$$

As autofunções dependem de um certo número de parâmetros $\{\mu\}$, para calcular o valor de E é necessário fazer a minimização da expressão (2.27) em relação a estes parâmetros. Quanto mais próxima à função estiver do que seria a função de onda real para o problema, melhores são os resultados obtidos nos cálculos de energia.

H_n	Super- potenciais	Funções de Onda	Potenciais
H_0			$V_0(x)$
$H_{1,-}$	$w_1(x) = a_1x + b_1x^3$	$\Psi_0^{(1)}(x) = e^{-\int w_1(x).dx}$	$V_{1,-}(x) = w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}$
$H_{1,+}$			$V_{1,+}(x) = w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}$
$H_{2,-}$	$w_2(x) = a_2x + b_2x^3$	$\Psi_0^{(2)}(x) = e^{-\int w_2(x).dx}$	$V_{2,-}(x) = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)}$
$H_{2,+}$			$V_{2,+}(x) = w_2^2(x) + w_2'(x) + E_0^{(2)}$
$H_{3,-}$	$w_3(x) = a_3x + b_3x^3$	$\Psi_0^{(3)}(x) = e^{-\int w_3(x).dx}$	$V_{3,-}(x) = w_3^2(x) - w_3'(x) + E_0^{(3)}$
$H_{3,+}$			$V_{3,+}(x) = w_3^2(x) + w_3'(x) + E_0^{(3)}$
$H_{4,-}$	$w_4(x) = a_4x + b_4x^3$	$\Psi_0^{(4)}(x) = e^{-\int w_4(x).dx}$	$V_{4,-}(x) = w_4^2(x) - w_4'(x) + E_0^{(4)}$
$H_{4,+}$			$V_{4,+}(x) = w_4^2(x) + w_4'(x) + E_0^{(4)}$
$H_{5,-}$	$w_5(x) = a_5x + b_5x^3$	$\Psi_0^{(5)}(x) = e^{-\int w_5(x).dx}$	$V_{5,-}(x) = w_5^2(x) - w_5'(x) + E_0^{(5)}$
$H_{5,+}$			$V_{5,+}(x) = w_5^2(x) + w_5'(x) + E_0^{(5)}$
$H_{6,-}$	$w_6(x) = a_6x + b_6x^3$	$\Psi_0^{(6)}(x) = e^{-\int w_6(x).dx}$	$V_{6,-}(x) = w_6^2(x) - w_6'(x) + E_0^{(6)}$
$H_{6,+}$			$V_{6,+}(x) = w_6^2(x) + w_6'(x) + E_0^{(6)}$
$H_{7,-}$	$w_7(x) = a_7x + b_7x^3$	$\Psi_0^{(7)}(x) = e^{-\int w_7(x).dx}$	$V_{7,-}(x) = w_7^2(x) - w_7'(x) + E_0^{(7)}$
$H_{7,+}$			$V_{7,+}(x) = w_7^2(x) + w_7'(x) + E_0^{(7)}$
$H_{8,-}$	$w_8(x) = a_8x + b_8x^3$	$\Psi_0^{(8)}(x) = e^{-\int w_8(x).dx}$	$V_{8,-}(x) = w_8^2(x) - w_8'(x) + E_0^{(8)}$
$H_{8,+}$			$V_{8,+}(x) = w_8^2(x) + w_8'(x) + E_0^{(8)}$
$H_{9,-}$	$w_9(x) = a_9x + b_9x^3$	$\Psi_0^{(9)}(x) = e^{-\int w_9(x).dx}$	$V_{9,-}(x) = w_9^2(x) - w_9'(x) + E_0^{(9)}$

Tabela 2.2: Esquema para a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos, com os superpotenciais sugeridos, as funções de onda e os potenciais. Os potenciais $V_{n,-}(x)$ são os efetivos e os potenciais $V_{n,+}(x)$ são seus companheiros supersimétricos.

2.2- Aplicação do Formalismo Supersimétrico ao Potencial

$$V(x) = -\gamma x^2 + x^4$$

Como aplicação do formalismo descrito anteriormente vamos analisar um potencial formado por dois poços simétricos (Keung *et al.*, 1988),

$$V(x) = V_0(x) = -\gamma x^2 + x^4 \quad (2.28)$$

este potencial possui a forma indicada abaixo.

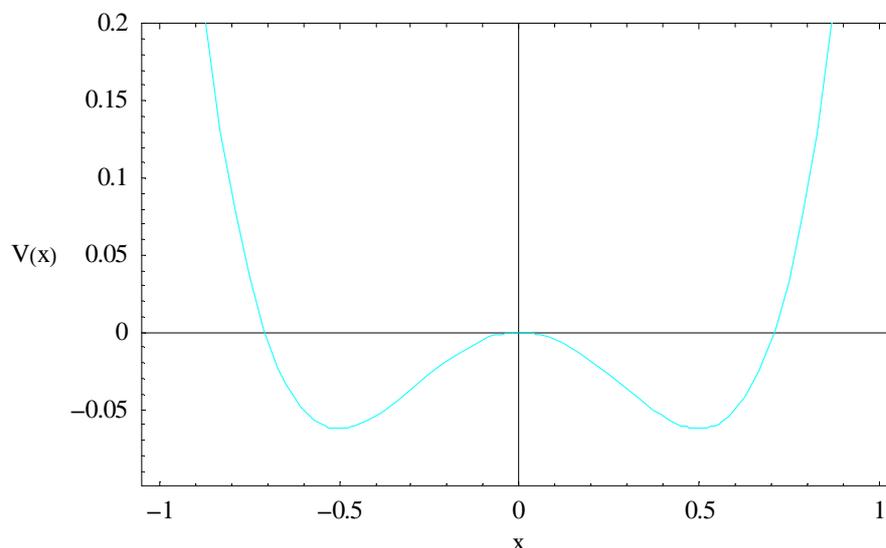


Figura 2.1: Gráfico para o potencial (2.28) com $\gamma = 0,5$ e x variando de - 1 a 1.

Este potencial não possui solução exata para a função de onda e autovalor de energia. Deste modo, foi utilizado o formalismo supersimétrico para calcular as funções de onda a partir do superpotencial, e o método variacional para calcular os níveis de energia.

Escrevendo o Hamiltoniano H_0 para este potencial, obtém-se

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} - \gamma x^2 + x^4. \quad (2.29)$$

Por outro lado, o Hamiltoniano fatorizado é dado por:

$$H_{1,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (2.30)$$

Para que (2.30) seja igual a (2.29) tem-se que satisfazer a seguinte condição:

$$w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = -\gamma x^2 + x^4. \quad (2.31)$$

Não é possível encontrar no caso geral a solução para esta equação, deste modo, é sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_1(x) = ax + bx^3. \quad (2.32)$$

Este superpotencial gera o potencial efetivo:

$$\begin{aligned} V_{1,-}(x) &= w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= (a^2 - 3b)x^2 + 2abx^4 + b^2x^6 - a + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Através da comparação entre os gráficos feitos para $V_0(x)$ e $V_{1,-}(x)$ (Apêndice I), pode-se observar que ambos possuem a mesma forma, ou seja, o superpotencial escolhido é uma boa aproximação, e por isso espera-se que forneça uma função de onda próxima da exata. Da relação (2.22) tem-se:

$$\Psi_0^{(1)}(x) = \exp\left[-\frac{ax^2}{2} - \frac{bx^4}{4}\right]. \quad (2.34)$$

Substituindo esta função de onda na expressão (2.27) obtém-se o autovalor de energia $E_0^{(1)}$. Neste caso, a minimização desta expressão

foi realizada em termos de dois parâmetros variacionais a e b (um exemplo para os cálculos de minimização está demonstrado no Apêndice I para $\gamma = 0,5$).

O cálculo do autovalor de energia para o primeiro estado excitado $E_1^{(1)}$ deve ser realizado, para isso determina-se o companheiro supersimétrico de $H_{1,-}$ dado em (2.30),

$$H_{1,+} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}, \quad (2.35)$$

escreve-se também $H_{2,-}$ em termos de novos operadores

$$H_{2,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)}. \quad (2.36)$$

Para que (2.35) e (2.36) sejam iguais, $w_2(x)$ tem que satisfazer a seguinte equação,

$$w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} \quad (2.37)$$

sendo

$$\begin{aligned} V_{1,+}(x) &= w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= (a^2 + 3b)x^2 + 2abx^4 + b^2x^6 + a + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (2.38)$$

o potencial companheiro supersimétrico obtido através da inversão dos operadores. Este deve ter uma forma similar ao potencial efetivo $V_{2,-}(x)$ obtido por $w_2(x)$. Para que isto ocorra é sugerido um superpotencial do tipo,

$$w_2(x) = cx + dx^3 \quad (2.39)$$

este superpotencial gera o seguinte potencial efetivo:

$$\begin{aligned} V_{2,-}(\mathbf{x}) &= w_2^2(\mathbf{x}) - w_2'(\mathbf{x}) + E_0^{(2)} = \\ &= (c^2 - 3d)x^2 + 2cdx^4 + d^2x^6 - c + E_0^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Novamente faz-se a comparação gráfica das expressões (2.40) com (2.38), (em (2.38) usam-se os valores minimizados para os parâmetros a e b) onde observa-se uma forma semelhante (Apêndice I).

A partir do superpotencial (2.39) tem-se a função de onda:

$$\Psi_0^{(2)}(\mathbf{x}) = \exp\left[-\frac{c\mathbf{x}^2}{2} - \frac{d\mathbf{x}^4}{4}\right]. \quad (2.41)$$

Esta função de onda foi usada no método variacional através da expressão (2.27) para calcular $E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$ com dois parâmetros variacionais c e d.

O mesmo procedimento pode ser usado para determinar os autovalores para o segundo e o terceiro estados excitados. Os superpotenciais são sugeridos para cada Hamiltoniano e através destes as funções de onda e os potenciais efetivos são obtidos (como esquematizado na Tabela 2.2). As funções de onda são usadas no método variacional para a obtenção dos autovalores de energia. Neste exemplo específico a forma dos superpotenciais, conseqüentemente da função de onda para o estado fundamental de cada membro da hierarquia, é a mesma. Isto não é regra geral mas facilita os cálculos. Pode-se verificar numericamente que as funções de onda do Hamiltoniano original obtidas pela relação (2.23) são ortogonais. Por exemplo, para $\gamma = 0,5$ o produto interno de $\Psi_0^{(1)}(\mathbf{x})$ e $\Psi_1^{(1)}(\mathbf{x})$

é da ordem de 10^{-11} . O resultado, como esperado, piora na medida que γ e n aumentam, por exemplo para $\gamma = 2$ tem-se $\int \Psi_2^{(1)}(\mathbf{x})\Psi_3^{(1)}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx 10^{-8}$.

Com o objetivo de confirmar os resultados encontrados através do formalismo supersimétrico e método variacional, foram realizados também cálculos de integração numérica (Harvey & Tobochnik, 1996) para o potencial dado em (2.28). A rotina utilizada para estes cálculos é mostrada no Apêndice I.

Nas Tabelas 2.3 e 2.4 estão apresentados os resultados para $E_0(V)$, $E_1(V)$, $E_2(V)$ e $E_3(V)$ para vários valores do parâmetro γ . Os resultados são comparados com os valores obtidos através da integração numérica $E_0(N)$, $E_1(N)$, $E_2(N)$ e $E_3(N)$.

Pode-se comparar também os resultados obtidos neste trabalho para $E_0(V)$ e $E_1(V)$ com resultados encontrados através da expansão em série de energia (Castro & Dutra, 2000) e com os resultados encontrados na literatura (Keung *et al.*, 1988) obtidos pelo método de Runge-Kutta, neste caso para alguns valores de γ .

γ	$E_0(V)$	$E_0(N)$	Erro (%)	$E_1(V)$	$E_1(N)$	Erro (%)
0,1	1,023910	1,023810	0,01	3,71064	3,70897	0,04
0,2	0,986646	0,986540	0,01	3,61890	3,61704	0,05
0,3	0,948629	0,948507	0,01	3,52596	3,52390	0,06
0,4	0,909820	0,909681	0,01	3,43179	3,42950	0,07
0,5	0,870181	0,870022	0,02	3,33636	3,33381	0,08
0,6	0,829670	0,829488	0,02	3,23962	3,23679	0,09
0,7	0,788243	0,788035	0,03	3,14155	3,13840	0,10
0,8	0,745852	0,745613	0,03	3,04210	3,03859	0,11
0,9	0,702447	0,702172	0,04	2,94123	2,93733	0,13
1	0,657972	0,657656	0,05	2,83891	2,83456	0,15
2	0,139170	0,137786	1,00	1,72629	1,71304	0,77

Tabela 2.3: Resultados para os autovalores de energia (em Rydbergs) para o potencial dado em (2.28) com valores diferentes de γ . $E_0(V)$ e $E_1(V)$ são os valores obtidos através do método variacional. $E_0(N)$ e $E_1(N)$ representa os valores encontrados através da integração numérica. Na quarta e sétima colunas estão os erros percentuais.

γ	$E_2(V)$	$E_2(N)$	Erro (%)	$E_3(V)$	$E_3(N)$	Erro (%)
0,1	7,31384	7,33079	0,23	11,54258	11,48857	0,47
0,2	7,18687	7,20491	0,25	11,38692	11,33136	0,49
0,3	7,05889	7,07809	0,27	11,23045	11,17319	0,51
0,4	6,92988	6,95033	0,29	11,07307	11,01406	0,54
0,5	6,79984	6,82162	0,32	10,91477	10,85396	0,56
0,6	6,66874	6,69197	0,35	10,75556	10,69288	0,59
0,7	6,53660	6,56137	0,38	10,59547	10,53083	0,61
0,8	6,40340	6,42982	0,41	10,43448	10,36778	0,64
0,9	6,26913	6,29734	0,45	10,27258	10,20375	0,67
1	6,13379	6,16393	0,50	10,10978	10,03872	0,71
2	4,72244	4,78245	1,27	8,43395	8,33293	1,21

Tabela 2.4: Resultados para os autovalores de energia (em Rydbergs) para o potencial dado em (2.28) com valores diferentes de γ . $E_2(V)$ e $E_3(V)$ são os valores obtidos através do método variacional. $E_2(N)$ e $E_3(N)$ representa os valores encontrados através da integração numérica. Na quarta e sétima colunas estão os erros percentuais.

Analizando os resultados mostrados nas Tabelas 2.3 e 2.4 pode-se observar que os autovalores de energia encontrados através do método variacional, concordam com os valores obtidos através da integração numérica. A tendência geral é que os resultados sejam melhores para valores pequenos de γ e para níveis mais baixos de energia. Isto ocorre porque para o estado fundamental e primeiro estado excitado existem menos aproximações do que para os estados superiores.

Os resultados para a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental para o potencial (2.28) com γ igual a 0,5, 1 e 2 também podem ser comparados com os cálculos de Runge-Kutta (Keung *et al.*, 1988).

**EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK
E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER
ASSOCIADA**

III. EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER ASSOCIADA

A equação de Fokker-Planck geral para uma variável \underline{x} possui a forma (Risken, 1989),

$$\frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{x}) + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{D}^{(2)}(\mathbf{x}) \right] W(\mathbf{x}, t) = L_{FP} W(\mathbf{x}, t), \quad (3.1)$$

onde $W(\mathbf{x}, t)$ é a densidade de probabilidade, L_{FP} é o operador Fokker-Planck, $\mathbf{D}^{(2)}(\mathbf{x}) > 0$ é chamado de coeficiente de difusão e $\mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{x})$ é o coeficiente de flutuação.

A equação de Fokker-Planck normalizada é obtida fazendo uma transformação apropriada, onde o coeficiente de difusão, em geral, dependente de \underline{x} , é adotado como sendo constante $\mathbf{D}^{(2)}(\mathbf{x}) = D$. Para o caso de uma variável esta transformação conduz a

$$\frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} U'(\mathbf{x}) + D \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} \right] W(\mathbf{x}, t), \quad (3.2)$$

sendo $U(\mathbf{x})$ o potencial escrito como:

$$U(\mathbf{x}) = -\int_{\mathbf{x}} \mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (3.3)$$

Pode-se escrever $W(\mathbf{x}, t)$ como o produto de duas funções separadas, uma dependente da posição e outra dependente do tempo, da seguinte forma:

$$W(\mathbf{x}, t) = \varphi(\mathbf{x}) \cdot e^{-\lambda t}. \quad (3.4)$$

Substituindo esta expressão na equação de Fokker-Planck (3.1) tem-se,

$$\mathbf{L}_{\text{FP}} \varphi(\mathbf{x}) = -\lambda \varphi(\mathbf{x}) \quad (3.5)$$

onde $\varphi(\mathbf{x})$ são as autofunções e λ os autovalores do operador Fokker-Planck (\mathbf{L}_{FP}), com condições de contorno apropriadas.

O operador Fokker-Planck pode ser escrito da seguinte forma,

$$\mathbf{L}_{\text{FP}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{D} e^{-\Phi(\mathbf{x})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} e^{\Phi(\mathbf{x})} \quad (3.6)$$

onde $\Phi(\mathbf{x})$ é dado por:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{U}(\mathbf{x})}{\mathbf{D}}. \quad (3.7)$$

O operador, não Hermitiano, (3.6) é geral podendo ser escrito de forma similar quando o coeficiente de difusão depende da posição. Na forma Hermitiana pode-se escrever o operador $\underline{\mathbf{L}}$ como sendo:

$$\underline{\mathbf{L}} = e^{\Phi/2} \mathbf{L}_{\text{FP}} e^{-\Phi/2}. \quad (3.8)$$

Se $\varphi_n(\mathbf{x})$ são as autofunções para o operador Fokker-Planck (\mathbf{L}_{FP}) com os autovalores λ_n , como mostrado na equação (3.5), então as funções,

$$\Psi_n(\mathbf{x}) = e^{\Phi(\mathbf{x})/2} \cdot \varphi_n(\mathbf{x}) \quad (3.9)$$

são as autofunções para o operador $\underline{\mathbf{L}}$ dado pela expressão (3.8), com os mesmos autovalores λ_n ,

$$\underline{\mathbf{L}} \Psi_n(\mathbf{x}) = -\lambda_n \Psi_n(\mathbf{x}). \quad (3.10)$$

As autofunções para os operadores Hermitianos usualmente formam um conjunto completo. A relação para as autofunções $\Psi_n(\mathbf{x})$ ou $\varphi_n(\mathbf{x})$ pode ser escrita como:

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \sum_n \Psi_n(\mathbf{x}) \Psi_n(\mathbf{x}') = e^{\Phi(\mathbf{x})/2 + \Phi(\mathbf{x}')/2} \sum_n \varphi_n(\mathbf{x}) \varphi_n(\mathbf{x}'). \quad (3.11)$$

Para obter a expansão para a probabilidade de transição em autofunções, tem-se que substituir a expressão (3.11) para a função δ e a expressão (3.5) para o operador Fokker-Planck em,

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = e^{L_{FP}(\mathbf{x})(t-t')} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.12)$$

ou equivalentemente:

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = e^{\Phi(\mathbf{x}')/2 - \Phi(\mathbf{x})/2} \sum_n \Psi_n(\mathbf{x}) \Psi_n(\mathbf{x}') e^{-\lambda_n(t-t')}. \quad (3.13)$$

A equação de Fokker-Planck com uma variável pode sempre ser transformada em uma equação de Fokker-Planck normalizada, como dado em (3.2), através de uma transformação de variável. Assim a expressão obtida para o operador \underline{L} tem a mesma forma que o operador Hamiltoniano encontrado em Mecânica Quântica, isto é,

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} - \mathbf{V}_s(\mathbf{x}), \quad (3.14)$$

com o potencial:

$$\mathbf{V}_s(\mathbf{x}) = \frac{[\mathbf{U}'(\mathbf{x})]^2}{4\mathbf{D}} - \frac{\mathbf{U}''(\mathbf{x})}{2}. \quad (3.15)$$

A expressão (3.15) garante que o autovalor seja zero para a solução estacionária dada por:

$$\Psi_0(\mathbf{x}) = \sqrt{N} \exp\left[-\frac{U(\mathbf{x})}{2D}\right] = \sqrt{N} \cdot e^{-\Phi(\mathbf{x})/2}. \quad (3.16)$$

Quando aplica-se a transformação (3.9) na densidade de probabilidade $W(\mathbf{x},t)$ dada em (3.4), a equação de Fokker-Planck (3.2) fica equivalente a equação de Schrödinger dependente do tempo, onde o tempo (imaginário) é substituído por $t_{\text{Schröd}} = -i\hbar t$ e a massa dada por

$$m_{\text{Schröd}} = \frac{\hbar^2}{2D}.$$

A equação de Schrödinger associada a equação de Fokker-Planck, pode ser tratada variacionalmente através das funções de onda obtidas utilizando o formalismo supersimétrico, como mostrado no Capítulo II. O cálculo para a probabilidade de transição (3.13) pode ser realizado com estas funções de onda que são próximas às “reais”. Deste modo, tem-se um método estruturado para produzir expressões analíticas aproximadas para a probabilidade de transição, possibilitando um estudo detalhado de todo o processo.

**ANÁLISE DA EQUAÇÃO
DE FOKKER-PLANCK PARA UM
POTENCIAL BIESTÁVEL SIMÉTRICO**

IV. ANÁLISE DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA UM POTENCIAL BIESTÁVEL SIMÉTRICO

A metodologia sugerida usando o formalismo supersimétrico (para determinar as funções de onda aproximadas) e método variacional (para determinar os níveis de energia com os parâmetros das funções de onda) é inicialmente usado para estudar o potencial específico (So & Liu, 2000) dado por,

$$U(x) = -0,5x^2 + 0,25x^4 \quad (4.1)$$

que possui a forma apresentada na Figura 4.1.

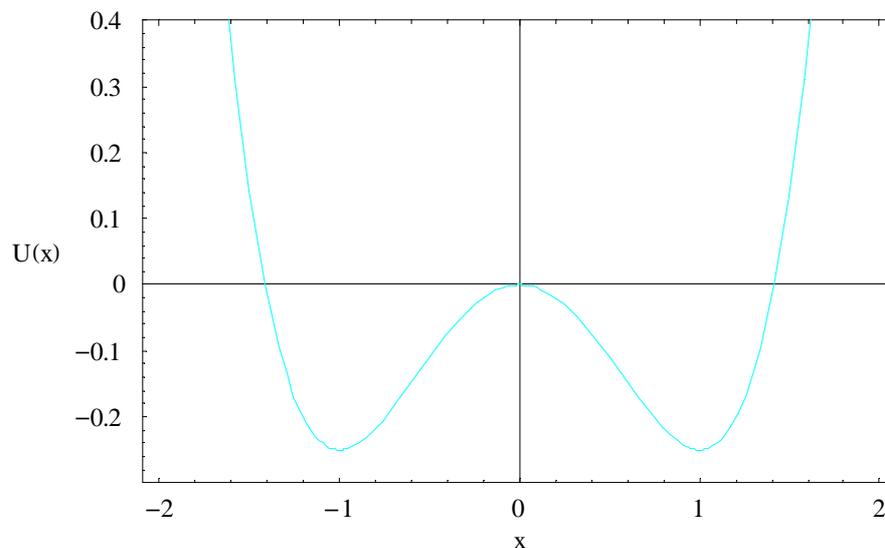


Figura 4.1: Gráfico para o potencial dado em (4.1) para x variando de -2 a 2.

Usando a equação (3.15) obtém-se o seguinte potencial a ser usado na equação similar a de Schrödinger,

$$V_S(\mathbf{x}) = V_0(\mathbf{x}) = \frac{(\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x}^4 + \mathbf{x}^6)}{4D} - \frac{(3\mathbf{x}^2 - 1)}{2} \quad (4.2)$$

nos cálculos apresentados neste trabalho é usado $D = 0,5$. Na Figura 4.2 está apresentada a forma para o potencial (4.2).

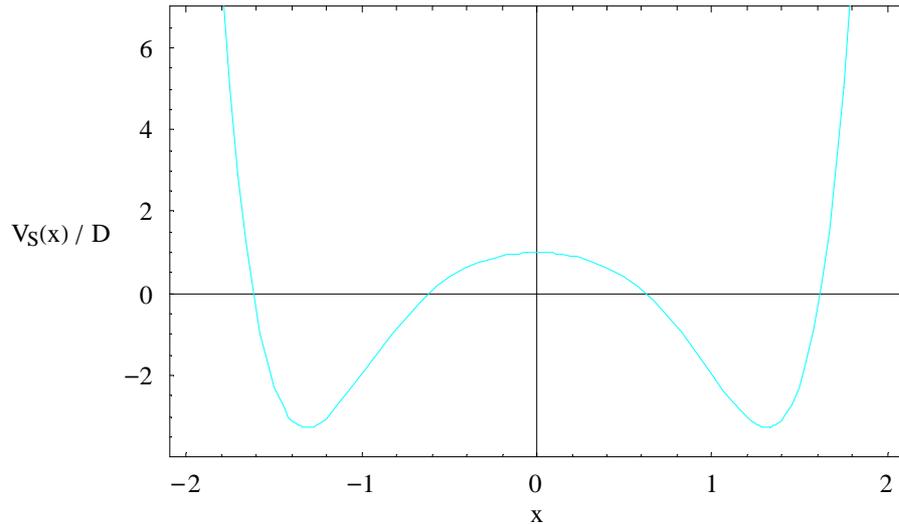


Figura 4.2: Gráfico para o potencial de Schrödinger dado em (4.2) para x variando de -2 a 2 .

Este potencial permite a determinação analítica exata do superpotencial apenas para o estado fundamental. Assim, para os outros membros da hierarquia de Hamiltonianos é obtida uma forma aproximada para o superpotencial.

A equação de Schrödinger a ser resolvida é escrita como,

$$H\Psi_n(\mathbf{x}) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{V_S(\mathbf{x})}{D} \right] \Psi_n(\mathbf{x}) = E_n \Psi_n(\mathbf{x}), \quad E_n = \frac{\lambda_n}{D}. \quad (4.3)$$

Escrevendo o Hamiltoniano H_0 para o potencial dado em (4.2)

obtém-se:

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{(x^2 - 2x^4 + x^6)}{4D^2} - \frac{(3x^2 - 1)}{2D}. \quad (4.4)$$

Tem-se também o Hamiltoniano fatorizado,

$$H_{1,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (4.5)$$

Para que (4.5) seja igual a (4.4) tem-se que satisfazer a seguinte condição:

$$w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = \frac{(x^2 - 2x^4 + x^6)}{4D^2} - \frac{(3x^2 - 1)}{2D}. \quad (4.6)$$

É sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_1(x) = \frac{a_1 x}{f} + \frac{b_1 x^3}{f}. \quad (4.7)$$

Este superpotencial gera o potencial efetivo dado por,

$$\begin{aligned} V_{1,-}(x) &= w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= \frac{(a_1^2 x^2 + 2a_1 b_1 x^4 + b_1^2 x^6)}{f^2} - \frac{(3b_1 x^2 + a_1)}{f} + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde substituindo a expressão acima em (4.6) observa-se que existe uma solução exata para o estado fundamental ($n = 0$) dada por: $a_1 = -1$, $b_1 = 1$, $f = 2D$, como o caso a ser analisado corresponde a $D = 0,5$, ou seja, $f = 1$ e finalmente $E_0^{(1)} = 0$.

O superpotencial dado em (4.7) fornece também a seguinte função de onda

$$\Psi_0^{(1)}(x) = e^{-\int w_1(x).dx} = \exp\left[-\frac{a_1 x^2}{2} - \frac{b_1 x^4}{4}\right]. \quad (4.9)$$

Para o cálculo do autovalor de energia para o primeiro estado excitado determina-se o companheiro supersimétrico de $H_{1,-}$ dado em (4.5),

$$H_{1,+} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (4.10)$$

Escreve-se também $H_{2,-}$ em termos de novos operadores,

$$H_{2,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)}. \quad (4.11)$$

Para que (4.10) e (4.11) sejam iguais, $w_2(x)$ tem que satisfazer a seguinte equação,

$$w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} \quad (4.12)$$

onde

$$\begin{aligned} V_{1,+}(x) &= w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= \frac{(a_1^2 x^2 + 2a_1 b_1 x^4 + b_1^2 x^6)}{f^2} + \frac{(3b_1 x^2 + a_1)}{f} + E_0^{(1)} = \\ &= x^6 - 2x^4 + 4x^2 - 1 \end{aligned} \quad (4.13)$$

é o potencial companheiro supersimétrico obtido através da inversão dos operadores, neste caso com os parâmetros calculados. Este potencial possui a forma gráfica a ser comparada com o potencial efetivo $V_{2,-}(x)$ obtido através do superpotencial $w_2(x)$.

Como não é possível encontrar a solução para a equação (4.12), é sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_2(\mathbf{x}) = \frac{a_2 \mathbf{x}}{f} + \frac{b_2 \mathbf{x}^3}{f}, \quad (4.14)$$

relembrando que o caso analisado corresponde a $D = 0,5$, ou seja, $f = 1$. Este superpotencial gera o seguinte potencial efetivo:

$$\begin{aligned} V_{2,-}(\mathbf{x}) &= w_2^2(\mathbf{x}) - w_2'(\mathbf{x}) + E_0^{(2)} = \\ &= (a_2^2 \mathbf{x}^2 + 2a_2 b_2 \mathbf{x}^4 + b_2^2 \mathbf{x}^6) - (3b_2 \mathbf{x}^2 + a_2) + E_0^{(2)} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Para verificar se o superpotencial (4.14) é uma boa sugestão, faz-se a comparação gráfica das expressões (4.13) para $V_{1,+}(\mathbf{x})$ com (4.15) para $V_{2,-}(\mathbf{x})$ com os valores minimizados dos parâmetros variacionais. Observa-se que os potenciais possuem formas semelhantes, ou seja, o superpotencial sugerido $w_2(\mathbf{x})$ é uma boa sugestão. Embora não mostrado aqui, esta comparação é realizada em todos os passos que envolvem a introdução de um superpotencial efetivo, testando a conveniência das funções utilizadas nos cálculos.

O superpotencial (4.14) fornece a função de onda,

$$\Psi_0^{(2)}(\mathbf{x}) = e^{-\int w_2(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}} = \exp \left[-\frac{a_2 \mathbf{x}^2}{2} - \frac{b_2 \mathbf{x}^4}{4} \right] \quad (4.16)$$

esta função é usada no método variacional através da expressão (2.27) para calcular o autovalor de energia para o primeiro estado excitado $E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$, com dois parâmetros variacionais a_2 e b_2 .

Para determinar os autovalores para os demais estados excitados é necessário a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos, ou seja, sugerir os superpotenciais para cada Hamiltoniano. Estes superpotenciais efetivos geram as funções de onda e os potenciais

efetivos; estas funções de onda são utilizadas no método variacional para a obtenção dos autovalores de energia. O procedimento descrito anteriormente está esquematizado na Tabela 2.2.

No Apêndice II estão calculadas as funções de onda no estado fundamental para cada Hamiltoniano obtidas através dos superpotenciais sugeridos (como mostrado na terceira coluna da Tabela 2.2) com os parâmetros variacionais minimizados. Estão também os cálculos necessários para obtenção das funções de onda normalizadas para o primeiro Hamiltoniano e seus respectivos gráficos.

A exemplo do que foi feito no Capítulo II foi possível usar a mesma forma funcional para o superpotencial sugerido. É bom lembrar que este fato não é requerido pelo método, porém esta condição facilita os cálculos.

Na Tabela 4.1 estão os parâmetros a_n e b_n minimizados, os autovalores de energia obtidos através do método variacional (EV_n), os autovalores obtidos através do método de diagonalização de estados dependentes (ES_n) (So & Liu, 2000) e os autovalores obtidos através da integração numérica (EI_n) (Harvey & Tobochnik, 1996).

Observa-se que os resultados obtidos pela integração numérica estão próximos daqueles obtidos pelo método de diagonalização de estados dependentes.

Parâmetros Variacionais		$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = 1$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 1,68891$	$b_2 = 0,28560$	$EV_1 = 0,4238512$
$a_3 = 2,09903$	$b_3 = 0,24474$	$EV_2 = 2,319117$
$a_4 = 2,40486$	$b_4 = 0,21999$	$EV_3 = 4,571588$
$a_5 = 2,65375$	$b_5 = 0,20277$	$EV_4 = 7,101165$
$a_6 = 2,86609$	$b_6 = 0,18984$	$EV_5 = 9,861245$
$a_7 = 3,05270$	$b_7 = 0,17962$	$EV_6 = 12,82074$
$a_8 = 3,22008$	$b_8 = 0,17127$	$EV_7 = 15,95720$
$a_9 = 3,37245$	$b_9 = 0,16425$	$EV_8 = 19,25351$
$a_{10} = 3,51274$	$b_{10} = 0,15825$	$EV_9 = 22,69614$

ES_n	EI_n
$ES_0 = 0$	$EI_0 = 0$
$ES_1 = 0,4229446$	$EI_1 = 0,4229511$
$ES_2 = 2,314913$	$EI_2 = 2,314925$
$ES_3 = 4,503779$	$EI_3 = 4,503822$
$ES_4 = 7,175475$	$EI_4 = 7,175509$
$ES_5 = 10,27789$	$EI_5 = 10,27797$
$ES_6 = 13,75855$	$EI_6 = 13,75861$
$ES_7 = 17,58420$	$EI_7 = 17,58434$
$ES_8 = 21,72942$	$EI_8 = 21,72951$
$ES_9 = 26,17370$	$EI_9 = 26,17391$

Tabela 4.1: Parâmetros variacionais minimizados a_n e b_n , autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n), autovalores encontrados através do método SDD (ES_n) e através da integração numérica (EI_n).

O próximo passo é calcular a probabilidade de transição $(P(x, t | 0, 0))$ dada pela expressão (3.13). Para isso utiliza-se os valores λ_n descritos na Tabela 4.1 e $\Phi(x)$ é dado substituindo a expressão (4.1) em (3.7), levando a

$$\Phi(x) = -x^2 + 0,5x^4. \quad (4.17)$$

As funções de onda para o primeiro Hamiltoniano são obtidas aplicando os operadores bosônicos nas funções de onda dos estados fundamentais para cada Hamiltoniano, obtendo assim as funções de onda aproximadas dos estados excitados para o primeiro Hamiltoniano como mostrado na Tabela 2.1.

No Apêndice II está descrito o procedimento necessário para o cálculo das funções de onda para o primeiro Hamiltoniano e seus respectivos gráficos. É necessário calcular a constante de normalização nos casos em que a função de onda não se anula em $x = 0$, pois para o cálculo da probabilidade de transição as funções tem que estar normalizadas, estes cálculos de normalização também são mostrados no Apêndice II.

O critério de truncamento para a somatória na expressão utilizada no cálculo da probabilidade de transição (3.13) foi usar os autovalores de energia até obter $\exp[-\lambda_n]$ da ordem de 10^{-10} . Este parece ser um bom critério uma vez que na expressão (3.13) há um termo $\exp[-\lambda_n(t - t')]$ multiplicando cada função de onda. Este critério é satisfeito quando calcula-se o nono nível de energia, por isso utiliza-se até o oitavo

nível de energia e suas respectivas funções de onda na expressão da probabilidade.

Deste modo, a probabilidade de transição obtida através da expressão (3.13) para $x' = 0$ e $t' = 0$ é:

$$P(x, t | 0, 0) = e^{[0,5x^2 - 0,25x^4]} \sum_{n=0}^8 \Psi_n(x) \Psi_n(0) \cdot e^{-\lambda_n \cdot t}. \quad (4.18)$$

Os resultados para $P(x, t | 0, 0)$ utilizando quatro valores diferentes de t estão na Figura 4.3. Foi usado o software Mathematica para o cálculo da probabilidade de transição e para construir a Figura 4.3, estes cálculos estão demonstrados no Apêndice II.

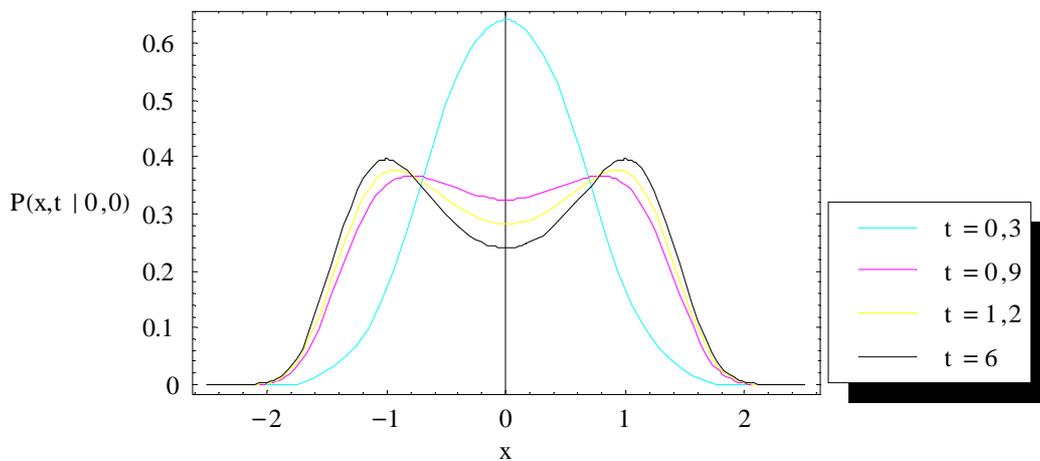


Figura 4.3: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição para quatro valores diferentes de t para um potencial bistável simétrico.

A primeira probabilidade de transição calculada corresponde a $t = 0,3$. Deve-se lembrar que para tempos muito pequenos a probabilidade de transição se aproxima da função delta de Dirac, cuja expansão é uma

série infinita. A necessidade de truncamento da série gera erros. Assim, para tempos menores há necessidade de um número maior de termos na série. Optou-se por fixar o número de termos na expansão e diminuir, nos cálculos numéricos, o valor do tempo até que os resultados se mostrassem inconsistentes, com o aparecimento de valores negativos para a probabilidade. Os limites inferiores para os tempos não interferiram na dinâmica estudada.

No método SDD, apresentado por So & Liu (2000), foi usado uma base com cem autofunções ($n = 100$), enquanto no formalismo usando supersimetria foi necessário determinar as autofunções até o nono estado excitado ($n = 9$). Nota-se que a forma gráfica obtida (Figura 4.3) está próxima daquela obtida pelo método SDD para $D = 0,1$.

As sugestões para os superpotenciais utilizados neste caso são indicadas para $D \geq 0,5$, pois para valores menores ocorrem problemas numéricos nos cálculos de minimização das energias. Porém, o formalismo permite que sejam sugeridas outras formas para os superpotenciais, mais apropriadas para valores menores do coeficiente de difusão.

**ANÁLISE DA EQUAÇÃO
DE FOKKER-PLANCK PARA UM
POTENCIAL BIESTÁVEL ASSIMÉTRICO**

V. ANÁLISE DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA UM POTENCIAL BIESTÁVEL ASSIMÉTRICO

A metodologia desenvolvida também pode ser aplicada no estudo de potenciais não simétricos. Como exemplo, o potencial biestável assimétrico (So & Liu, 2000),

$$U(x) = -0,5x^2 + 0,4x^3 + 0,25x^4 \quad (5.1)$$

é analisado e possui a forma indicada na Figura 5.1.

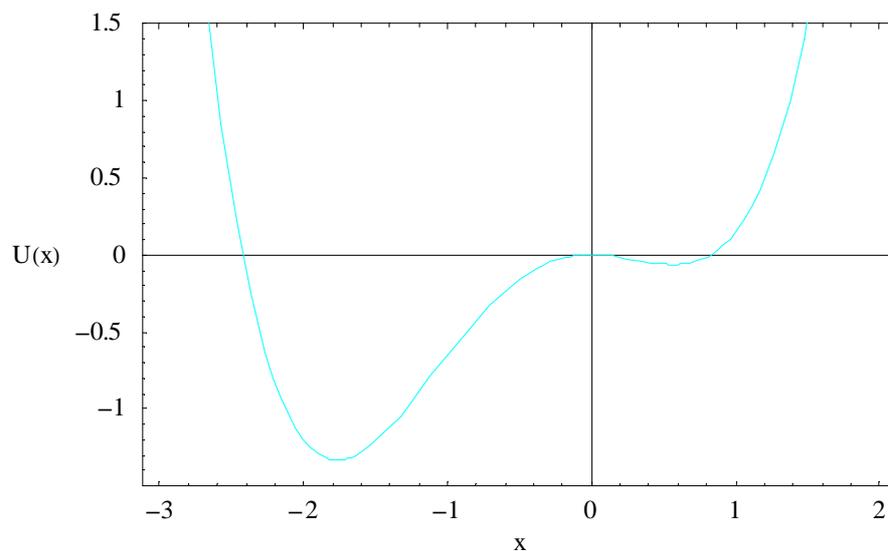


Figura 5.1: Gráfico para o potencial dado em (5.1) para x variando de -3 a 2.

Este tipo de potencial biestável assimétrico é próximo dos potenciais utilizados no estudo de enovelamento de proteína. No caso do potencial dado em (5.1) os resultados obtidos pelo formalismo discutido neste trabalho podem ser novamente comparados com os resultados obtidos pelo método de diagonalização de estados dependentes.

O potencial de Schrödinger referente ao potencial dado em (5.1) é escrito como

$$V_S(\mathbf{x}) = V_0(\mathbf{x}) = \frac{(-\mathbf{x} + 1, 2\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}^3)^2}{4D} - \frac{(-1 + 2, 4\mathbf{x} + 3\mathbf{x}^2)}{2}, \quad (5.2)$$

obtido substituindo a expressão (5.1) em (3.15), o valor referente a D é fixado em 0,5. A forma gráfica para o potencial (5.2) está apresentada na Figura 5.2.

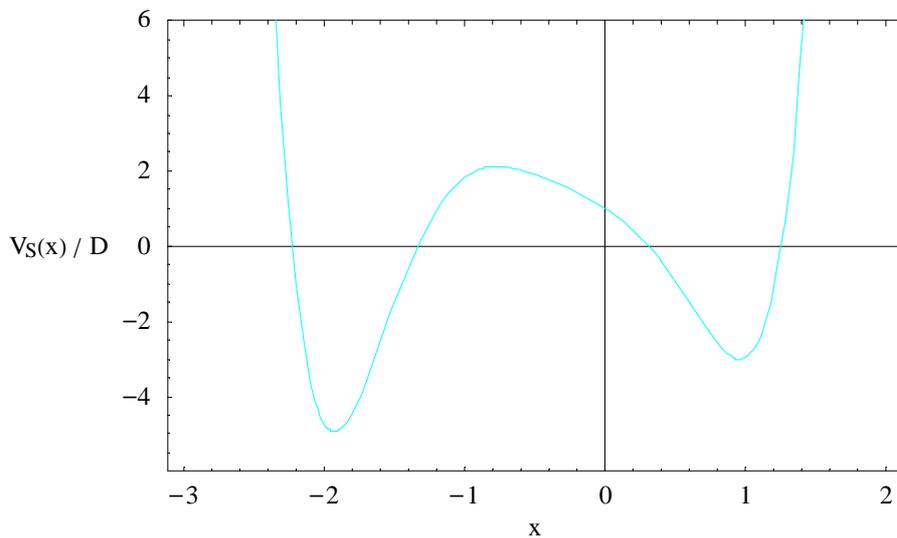


Figura 5.2: Gráfico para o potencial de Schrödinger dado em (5.2) para x variando de -3 a 2 .

A equação de Schrödinger a ser resolvida é escrita como,

$$\mathbf{H}\Psi_n(\mathbf{x}) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{V_S(\mathbf{x})}{D} \right] \Psi_n(\mathbf{x}) = E_n \Psi_n(\mathbf{x}), \quad E_n = \frac{\lambda_n}{D}. \quad (5.3)$$

Escrevendo o Hamiltoniano H_0 para o potencial dado em (5.2),

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{(-x+1, 2x^2+x^3)^2}{4D^2} - \frac{(-1+2, 4x+3x^2)}{2D}. \quad (5.4)$$

Tem-se também o Hamiltoniano fatorizado,

$$H_{1,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (5.5)$$

Para que (5.5) seja igual a (5.4) tem-se que satisfazer a seguinte condição:

$$w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = \frac{(-x+1, 2x^2+x^3)^2}{4D^2} - \frac{(-1+2, 4x+3x^2)}{2D}. \quad (5.6)$$

É sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_1(x) = \frac{a_1x}{f} + \frac{b_1x^2}{f} + \frac{c_1x^3}{f}. \quad (5.7)$$

Este superpotencial gera o potencial efetivo dado por,

$$\begin{aligned} V_{1,-}(x) &= w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= \frac{(a_1x + b_1x^2 + c_1x^3)^2}{f^2} - \frac{(a_1 + 2b_1x + 3c_1x^2)}{f} + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (5.8)$$

e substituindo a expressão acima em (5.6) observa-se que existe uma solução exata para o estado fundamental ($n = 0$) dada por: $a_1 = -1$, $b_1 = 1, 2$, $c_1 = 1$ e $f = 2D$ e $E_0^{(1)} = 0$. Como o caso a ser analisado corresponde a $D = 0,5$, tem-se $f = 1$.

O superpotencial dado em (5.7) fornece também a seguinte função de onda:

$$\Psi_0^{(1)}(x) = e^{-\int w_1(x).dx} = \exp\left[-\frac{a_1x^2}{2} - \frac{b_1x^3}{3} - \frac{c_1x^4}{4}\right]. \quad (5.9)$$

Para o cálculo do autovalor de energia para o primeiro estado excitado determina-se o companheiro supersimétrico de $H_{1,-}$ dado em (5.5),

$$H_{1,+} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (5.10)$$

Escreve-se também $H_{2,-}$ em termos de novos operadores,

$$H_{2,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)}. \quad (5.11)$$

Para que (5.10) e (5.11) sejam iguais, $w_2(x)$ tem que satisfazer a seguinte equação,

$$w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} \quad (5.12)$$

e

$$\begin{aligned} V_{1,+}(x) &= w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= \frac{(a_1x + b_1x^2 + c_1x^3)^2}{f^2} + \frac{(a_1 + 2b_1x + 3c_1x^2)}{f} + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (5.13)$$

é o potencial companheiro supersimétrico obtido através da inversão dos operadores. Este potencial possui a forma gráfica a ser comparada com o potencial efetivo $V_{2,-}(x)$ obtido através do superpotencial $w_2(x)$.

Como não é possível encontrar a solução para a equação (5.12), é sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_2(x) = a_2x + b_2x^2 + c_2x^3 + k_2, \quad (5.14)$$

este superpotencial gera o seguinte potencial efetivo:

$$V_{2,-}(x) = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)}. \quad (5.15)$$

Para verificar se o superpotencial (5.14) é uma boa sugestão, faz-se a comparação gráfica das expressões (5.13) para $V_{1,+}(x)$ com (5.15) para $V_{2,-}(x)$ onde neste potencial usam-se os valores minimizados para os parâmetros variacionais. Embora não mostrado aqui, observa-se que os potenciais possuem uma forma semelhante, ou seja o superpotencial sugerido $w_2(x)$ é uma boa sugestão.

O superpotencial (5.14) fornece a função de onda,

$$\Psi_0^{(2)}(\mathbf{x}) = e^{-\int w_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} = \exp\left[-\frac{a_2 \mathbf{x}^2}{2} - \frac{b_2 \mathbf{x}^3}{3} - \frac{c_2 \mathbf{x}^4}{4} - k_2 \mathbf{x}\right] \quad (5.16)$$

esta função é usada no método variacional através da expressão (2.27) para calcular o autovalor de energia para o primeiro estado excitado $E_0^{(2)} = E_1^{(1)}$, com quatro parâmetros variacionais a_2 , b_2 , c_2 e k_2 .

Para determinar os autovalores para os demais estados excitados é necessário a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos como mostrado na Tabela 2.2.

Na Tabela 5.1 estão os parâmetros a_n , b_n , c_n e k_n minimizados, os autovalores de energia obtidos através do método variacional (EV_n) e os autovalores obtidos através do método de diagonalização de estados dependentes (ES_n) (So & Liu, 2000).

Parâmetros Variacionais			
$a_1 = -1$	$b_1 = 1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$
$a_2 = 2,02357$	$b_2 = 0,38366$	$c_2 = 0,13677$	$k_2 = 0,49940$
$a_3 = 2,17624$	$b_3 = 0,34052$	$c_3 = 0,12670$	$k_3 = 0,79604$
$a_4 = 2,32256$	$b_4 = 0,31485$	$c_4 = 0,12155$	$k_4 = 1,02637$
$a_5 = 2,46990$	$b_5 = 0,35390$	$c_5 = 0,15115$	$k_5 = 1,20765$
$a_6 = 2,66943$	$b_6 = 0,49828$	$c_6 = 0,24091$	$k_6 = 1,37346$
$a_7 = 2,95211$	$b_7 = 0,60027$	$c_7 = 0,30353$	$k_7 = 1,57546$

$EV_n = \lambda_n$	ES_n
$EV_0 = 0$	$ES_0 = 0$
$EV_1 = 0,36101$	$ES_1 = 0,35917$
$EV_2 = 2,26822$	$ES_2 = 2,25005$
$EV_3 = 4,30638$	$ES_3 = 4,18710$
$EV_4 = 6,48469$	$ES_4 = 6,61504$
$EV_5 = 8,79767$	$ES_5 = 9,49306$
$EV_6 = 11,2719$	$ES_6 = 12,7475$

Tabela 5.1: Parâmetros variacionais minimizados, autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e valores encontrados através do método SDD (ES_n).

Para o cálculo da probabilidade de transição ($P(x, t | 0, 0)$) dada pela expressão (3.13), utilizam-se os valores λ_n descritos na Tabela 5.1, $\Phi(x)$ é dado substituindo a expressão (5.1) em (3.7),

$$\Phi(x) = -x^2 + 0,8x^3 + 0,5x^4 \quad (5.17)$$

e as funções de onda obtidas para o primeiro Hamiltoniano, ou seja, aplicando os operadores bosônicos nas funções de onda dos estados fundamentais para cada Hamiltoniano como mostrado na Tabela 2.1.

No Apêndice III estão calculadas as funções de onda no estado fundamental para cada Hamiltoniano com os parâmetros variacionais minimizados e está descrito o procedimento necessário para o cálculo das funções de onda normalizadas para o primeiro Hamiltoniano e seus respectivos gráficos.

Neste caso foi necessário para os cálculos utilizar até o sexto nível de energia e suas respectivas funções de onda, na expressão para a probabilidade de transição ($P(x, t | 0, 0)$).

A primeira probabilidade de transição calculada corresponde a $t = 0,32$. O critério adotado foi o mesmo daquele utilizado no caso do potencial simétrico. Neste contexto a determinação do valor para o tempo mínimo está vinculada ao número de autofunções usadas na expansão de $P(x, t | 0, 0)$, neste caso foram usadas sete autofunções.

Os resultados para a probabilidade de transição utilizando quatro valores diferentes de t estão na Figura 5.3 e os cálculos necessários estão demonstrados no Apêndice III. Pode-se observar que a forma gráfica

obtida está próxima daquela encontrada pelo método SDD (So & Liu, 2000) para $D = 0,1$.

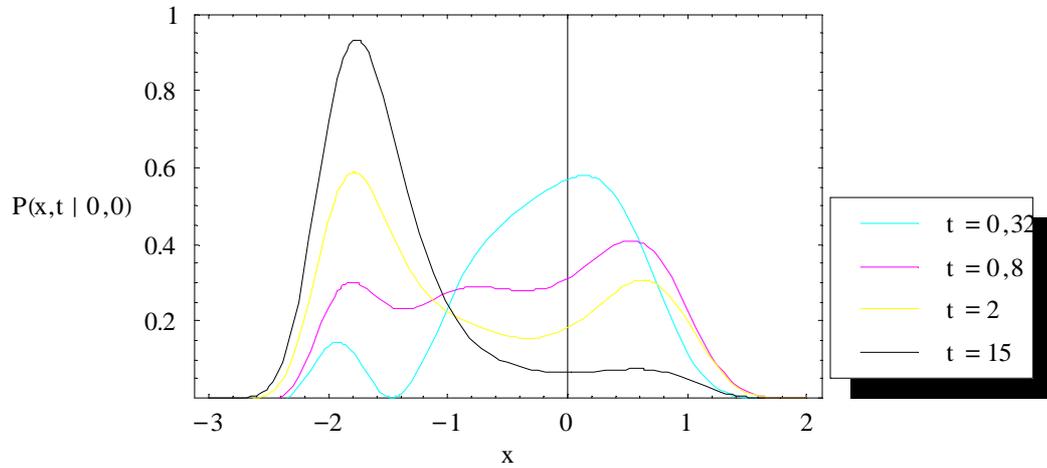


Figura 5.3: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição para quatro valores diferentes de t para um potencial bistável assimétrico.

ENVELAMENTO DE PROTEÍNA

VI. ENOVELAMENTO DE PROTEÍNA

A atividade biológica das proteínas orgânicas depende obrigatoriamente da manutenção conformacional protéica. Este estado chamado de estado nativo, naturalizado ou enovelado deve ser mantido para a funcionalidade do peptídeo.

Não é claro o procedimento utilizado pelo organismo para encontrar o estado enovelado mais estável para as proteínas. Por este motivo o processo de enovelamento e desenovelamento de proteínas tem sido um dos problemas mais envolventes da biofísica atual.

Nos laboratórios são provocadas mudanças no meio, por exemplo, variações de pH e temperatura, como agentes capazes de alterar o equilíbrio entre os estados enovelado e desenovelado. Estes estudos fornecem elementos para o estabelecimento da relação entre a estrutura conformacional e a atividade protéica. Algumas características básicas de proteínas estão apresentadas no Apêndice IV.

Em relação ao aspecto teórico, existem vários modelos (Neumaier, 1997) com o objetivo de produzir um melhor entendimento sobre o processo de enovelamento e desenovelamento de proteína. Em particular, considera-se uma força guia que dirige o processo até seu mínimo de energia passando por vários mínimos locais (Onuchic *et al.*, 1997) conhecido como modelo de funil. Para estudar este sistema utilizam-se parâmetros de ordem, como o número de contatos nativos corretos (Q) (Socci *et al.*, 1996). Em outros casos utilizam-se coordenadas

de reação, que podem ser as transições de estados entre mínimos locais de um potencial (Neumaier, 1997).

Pode-se imaginar o processo de enovelamento, em termos mais simples, como se o sistema estivesse sujeito a um potencial com dois mínimos assimétricos. Em condições propícias, o mínimo de maior energia corresponderia ao estado desenovelado, enquanto o de menor energia ao estado enovelado (Socci *et al.*, 1996). A barreira de potencial entre eles teria papel importante na transição de um estado para o outro. No estudo do processo de enovelamento usando este modelo existem algumas questões a serem definidas, como por exemplo, a escolha de um potencial adequado à descrição do processo e a identificação dos parâmetros necessários para a realização dos cálculos.

O modelo tal como proposto acima encontra uma analogia com o estudo de difusão em um potencial biestável (Bryngelson & Wolynes, 1989; Caroli *et al.*, 1979) e uma maneira de tratá-lo é via equação de Fokker-Planck (Risken, 1989).

Como mostrado no Capítulo III pode-se através de mudanças apropriadas relacionar a equação de Fokker-Planck com a equação de Schrödinger e obter a expressão para a probabilidade de transição (Risken, 1989) em termos das funções de onda e autovalores de energia. Deste modo, o estudo da equação de Schrödinger resultante nos leva a obter informações sobre o processo de interesse, neste caso enovelamento de proteína.

No Capítulo II também foi abordada a técnica utilizada para o estudo da equação de Schrödinger baseada no formalismo supersimétrico, onde foi possível a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos. Esta abordagem fornece as funções de onda a serem utilizadas no método variacional para a determinação dos autovalores de energia, para o estado fundamental e estados excitados.

Esta metodologia foi utilizada em problemas quânticos envolvendo um potencial biestável simétrico (Capítulo IV) e um potencial biestável assimétrico (Capítulo V). As autofunções encontradas através da supersimetria com os parâmetros fixados através do método variacional, foram utilizadas para calcular a probabilidade de transição. Os resultados encontrados para os autovalores de energia e para o cálculo da probabilidade de transição para quatro valores diferentes de t , foram comparados com os valores encontrados pelo método de diagonalização de estados dependentes (So & Liu, 2000).

Através da comparação dos resultados obtidos por esta metodologia com os resultados encontrados na literatura, pode-se observar que os valores estão próximos tanto no que se refere aos autovalores de energia quanto à forma do gráfico para a probabilidade de transição. Deste modo, foi possível testar a metodologia desenvolvida e adquirir confiança nos resultados encontrados.

Os potenciais analisados anteriormente foram escolhidos também devido a sua semelhança com os potenciais utilizados no problema de enovelamento de proteína, em particular o assimétrico. O

próximo passo foi encontrar uma forma mais adequada para este potencial, que represente os potenciais utilizados no estudo de enovelamento de proteína.

Foi procurado um potencial de força média, ligado ao coeficiente de flutuação, que apresentasse uma forma adequada para ser utilizado no estudo de enovelamento de proteína. A forma escolhida foi,

$$U(x) = ax^2 + bx^3 + cx^4 \quad (6.1)$$

onde a , b e c são os parâmetros utilizados para definir o potencial, eles foram escolhidos de modo que o potencial acima tenha a forma mais similar possível se comparada com aqueles potenciais utilizados em enovelamento de proteína (Socci *et al.*, 1996). A forma (6.1) foi escolhida para permitir a existência de relações básicas no potencial, ou seja, ser biestável com poços assimétricos (Figura 6.1). A coordenada de reação usada neste caso é o parâmetro x que representa o número de contatos nativos corretos. Esta coordenada é discreta no caso de cálculo na rede (Monte Carlo) e será considerada contínua na versão analítica do modelo analisado neste trabalho.

O potencial foi escolhido de maneira a procurar manter as características principais do potencial apresentado por Socci *et al.* (1996), usando simulações obtidas pelo método de Monte Carlo. A forma gráfica para o potencial estudado, dado em (6.1), está apresentada na Figura 6.1.

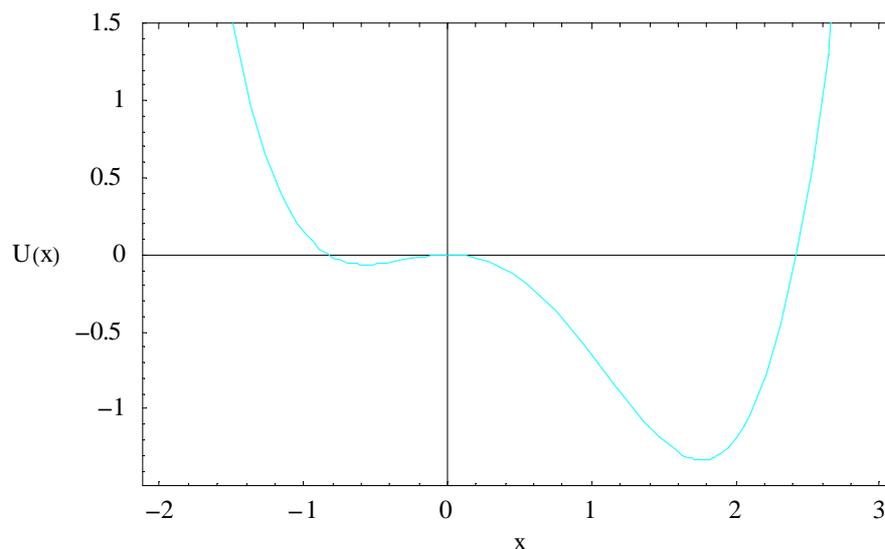


Figura 6.1: Gráfico para o potencial de Fokker-Planck $U(x)$ onde os parâmetros utilizados foram $a = -0,5$, $b = -0,4$ e $c = 0,25$.

Lembrando que a expressão (6.1) deve ser a utilizada na equação de Fokker-Planck, obtém-se um potencial a ser usado na equação de Schrödinger com a seguinte expressão,

$$V_S(x) = \frac{[U'(x)]^2}{4D} - \frac{U''(x)}{2} \quad (6.2)$$

ou seja;

$$V_S(x) = V_0(x) = \frac{(-x - 1, 2x^2 + x^3)^2}{4D} - \frac{(-1 - 2, 4x + 3x^2)}{2} \quad (6.3)$$

onde \underline{D} é o coeficiente de difusão que, a exemplo da referência Socci *et al.*, (1996), será admitido constante. A forma gráfica para este potencial é apresentada na Figura 6.2.

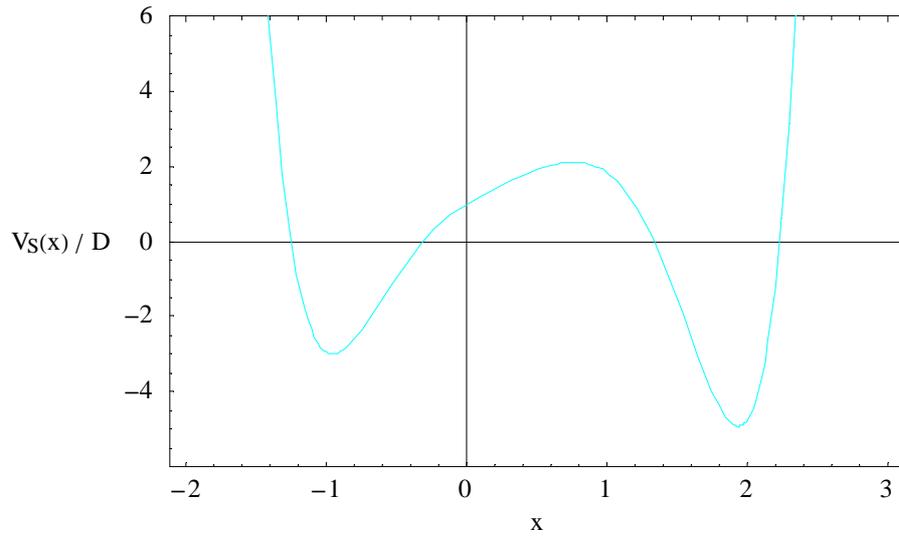


Figura 6.2: Gráfico para o potencial de Schrödinger dado em (6.3) com $D = 0,5$.

Seguindo a metodologia introduzida anteriormente, a equação de Schrödinger a ser resolvida é,

$$H\Psi_n(\mathbf{x}) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{V_S(\mathbf{x})}{D} \right] \Psi_n(\mathbf{x}) = E_n \Psi_n(\mathbf{x}), \quad E_n = \frac{\lambda_n}{D}. \quad (6.4)$$

O Hamiltoniano H_0 para o potencial dado em (6.3) é escrito como

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{(-x - 1, 2x^2 + x^3)^2}{4D^2} - \frac{(-1 - 2, 4x + 3x^2)}{2D} \quad (6.5)$$

onde usando $D = 0,5$ tem-se $\frac{1}{4D^2} = 1$ e $\frac{1}{2D} = 1$.

O Hamiltoniano fatorizado é escrito como,

$$H_{1,-} = a_1^+ a_1^- + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (6.6)$$

Para que (6.6) seja igual a (6.5) tem-se que satisfazer a seguinte condição:

$$w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = (-x - 1, 2x^2 + x^3)^2 - (-1 - 2, 4x + 3x^2). \quad (6.7)$$

É sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_1(x) = a_1x + b_1x^2 + c_1x^3. \quad (6.8)$$

Este superpotencial gera o potencial efetivo dado por,

$$\begin{aligned} V_{1,-}(x) &= w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= (a_1x + b_1x^2 + c_1x^3)^2 - (a_1 + 2b_1x + 3c_1x^2) + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (6.9)$$

substituindo esta expressão em (6.7) observa-se que existe uma solução exata para o estado fundamental ($n = 0$) dada por: $a_1 = -1$, $b_1 = -1,2$ e $c_1 = 1$, e para o autovalor de energia $E_0^{(1)} = 0$.

O superpotencial dado em (6.8) fornece também a seguinte função de onda:

$$\Psi_0^{(1)}(x) = e^{-\int w_1(x).dx} = \exp\left[-\frac{a_1x^2}{2} - \frac{b_1x^3}{3} - \frac{c_1x^4}{4}\right]. \quad (6.10)$$

Para o cálculo do autovalor de energia para o primeiro estado excitado determina-se o companheiro supersimétrico de $H_{1,-}$ dado em (6.6),

$$H_{1,+} = a_1^- a_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)}. \quad (6.11)$$

Escreve-se também $H_{2,-}$ em termos de novos operadores,

$$H_{2,-} = a_2^+ a_2^- + E_0^{(2)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)}. \quad (6.12)$$

Para que (6.11) e (6.12) sejam iguais, $w_2(x)$ tem que satisfazer a seguinte equação,

$$w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} \quad (6.13)$$

sendo,

$$\begin{aligned} V_{1,+}(x) &= w_1^2(x) + w_1'(x) + E_0^{(1)} = \\ &= (a_1x + b_1x^2 + c_1x^3)^2 + (a_1 + 2b_1x + 3c_1x^2) + E_0^{(1)} \end{aligned} \quad (6.14)$$

o potencial companheiro supersimétrico, obtido através da inversão dos operadores a_1^+ e a_1^- . Este potencial possui a forma gráfica a ser comparada com o potencial efetivo $V_{2,-}(x)$ obtido através do superpotencial $w_2(x)$.

Como não é possível encontrar a solução para a equação (6.13), é sugerido um superpotencial do tipo:

$$w_2(x) = a_2x + b_2x^2 + c_2x^3 + k_2, \quad (6.15)$$

este superpotencial gera o seguinte potencial efetivo:

$$\begin{aligned} V_{2,-}(x) &= w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} = \\ &= (a_2x + b_2x^2 + c_2x^3 + k_2)^2 - (a_2 + 2b_2x + 3c_2x^2) + E_0^{(2)} \end{aligned} \quad (6.16)$$

Para verificar se o superpotencial (6.15) é uma boa sugestão, faz-se a comparação gráfica (Figura 6.3) das expressões (6.16) para $V_{2,-}(x)$ com (6.14) para $V_{1,+}(x)$, onde no potencial (6.16) usa-se os valores minimizados obtidos para os parâmetros variacionais.

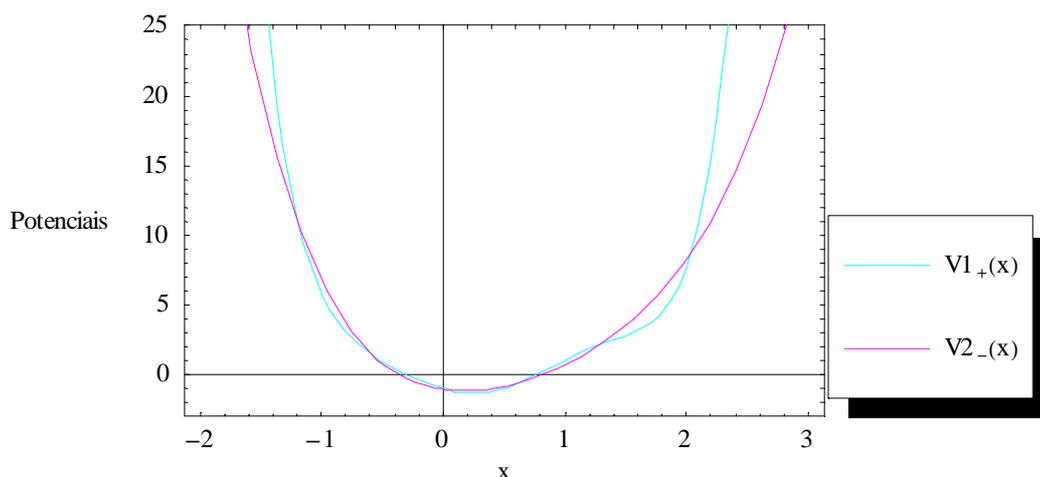


Figura 6.3: Comparação gráfica dos potenciais $V_{1,+}(x)$ e $V_{2,-}(x)$, onde os valores para os parâmetros do potencial $V_{2,-}(x)$ são $a_2 = 2,02380$, $b_2 = -0,38390$, $c_2 = 0,13680$ e $k_2 = -0,49946$.

Observa-se que os potenciais possuem uma forma semelhante, o que indica que o superpotencial sugerido $w_2(x)$ deve levar a resultados satisfatórios.

O superpotencial (6.15) fornece a função de onda,

$$\Psi_0^{(2)}(\mathbf{x}) = e^{-\int w_2(x).dx} = \exp\left[-\frac{a_2 x^2}{2} - \frac{b_2 x^3}{3} - \frac{c_2 x^4}{4} - k_2 x\right] \quad (6.17)$$

esta função foi usada no método variacional para calcular o autovalor de energia para o primeiro estado excitado $E_0^{(2)} = E_1^{(1)} = 0,36101$.

O próximo passo é determinar os autovalores para os demais estados excitados, e para isto é necessário fazer a construção da hierarquia de Hamiltonianos efetivos adotando o mesmo procedimento realizado nos Capítulos IV e V.

Na Tabela 6.1 estão os parâmetros a_n , b_n , c_n e k_n minimizados e os autovalores de energia obtidos através do método variacional (EV_n).

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 2,02380$	$b_2 = -0,38390$	$c_2 = 0,13680$	$k_2 = -0,49946$	$EV_1 = 0,36101$
$a_3 = 2,18054$	$b_3 = -0,32630$	$c_3 = 0,11716$	$k_3 = -0,80134$	$EV_2 = 2,26828$
$a_4 = 2,31522$	$b_4 = -0,29943$	$c_4 = 0,11054$	$k_4 = -1,02558$	$EV_3 = 4,31091$
$a_5 = 2,44087$	$b_5 = -0,27897$	$c_5 = 0,10494$	$k_5 = -1,21054$	$EV_4 = 6,48189$
$a_6 = 2,55693$	$b_6 = -0,26230$	$c_6 = 0,10009$	$k_6 = -1,36794$	$EV_5 = 8,77785$
$a_7 = 2,61708$	$b_7 = -0,15092$	$c_7 = 0,05406$	$k_7 = -1,50390$	$EV_6 = 11,1919$

Tabela 6.1: Parâmetros minimizados e autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) para $D = 0,5$.

As funções de onda obtidas para o Hamiltoniano original (equação 6.5) e os autovalores de energia serão utilizados para calcular a probabilidade de transição através da expressão:

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = e^{\Phi(\mathbf{x}')/2 - \Phi(\mathbf{x})/2} \sum_n \Psi_n(\mathbf{x}) \Psi_n(\mathbf{x}') \cdot e^{-\lambda_n(t-t')} \quad (6.18)$$

lembrando que $\Phi(\mathbf{x}) = \frac{U(\mathbf{x})}{D}$, $\Psi_n(\mathbf{x})$ são as funções de onda e $\lambda_n = E_n \cdot D$.

No Apêndice V estão os cálculos para a obtenção das funções de onda normalizadas, seus respectivos gráficos e os cálculos necessários para a probabilidade de transição. Na Figura 6.4 estão os resultados para $P(x,t | -0,6,0)$ utilizando quatro valores diferentes de t .

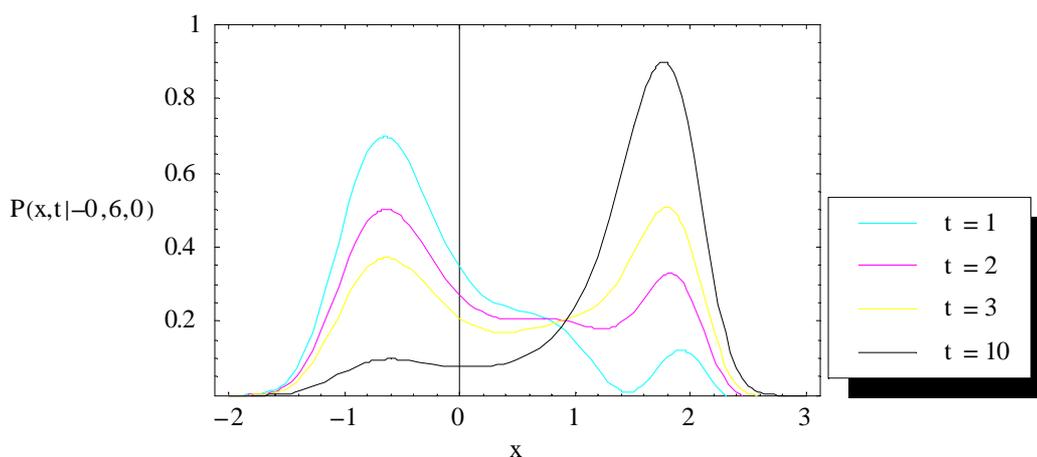


Figura 6.4: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,5$ para $t = 1$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.

Pode-se observar pela Figura 6.4 que a condição inicial corresponde a $x' = -0,6$ em $t' = 0$ no cálculo da probabilidade de transição. O objetivo desta mudança foi colocar o sistema inicialmente no estado desenovelado e analisar seu comportamento através da evolução temporal.

A primeira probabilidade de transição calculada corresponde a $t = 1$. A escolha deste tempo mínimo segue o mesmo critério utilizado nos casos dos potenciais simétrico e assimétrico. Neste caso foram usadas sete funções de onda para a expansão de $P(x,t | -0,6,0)$.

Foram calculadas as probabilidades totais de estados enovelado e desenovelado para diversos valores de tempo. Nestes cálculos foram usadas as expressões (Jun & Weaver, 2002):

$$N_{\text{enov}}(t) = \int_0^4 P(x, t | -0, 6, 0) dx \quad (6.19)$$

$$N_{\text{desenov}}(t) = \int_{-4}^0 P(x, t | -0, 6, 0) dx \quad (6.20)$$

onde $N_{\text{enov}}(t)$ são as probabilidades totais para o estado enovelado e $N_{\text{desenov}}(t)$ as probabilidades totais para o estado desenovelado. Na Figura 6.5 estão os gráficos destas probabilidades em função do tempo para $D = 0,5$.

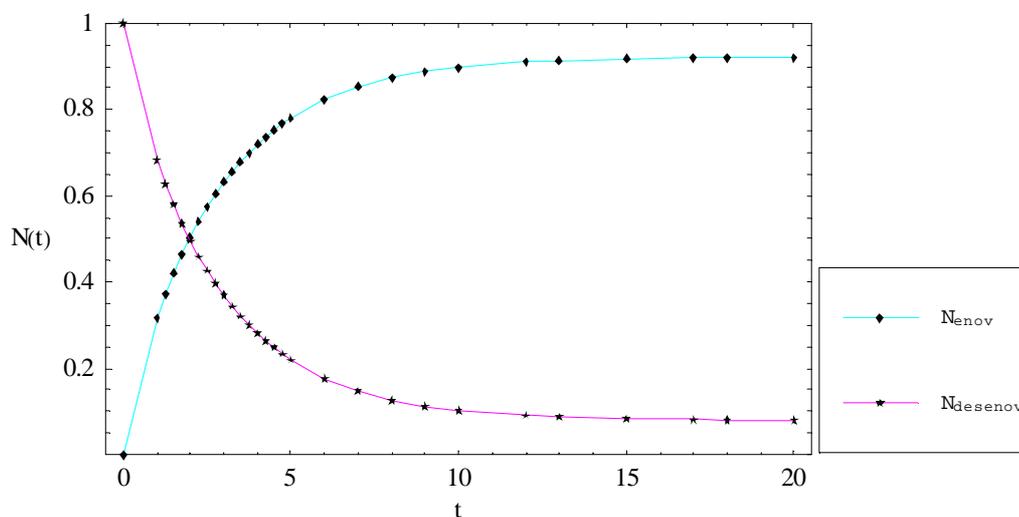


Figura 6.5: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado enovelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado (N_{desenov}) com $D = 0,5$.

Devido à existência de uma função delta em $t = 0$ (o que indica que todo o sistema está inicialmente desenovelado) observa-se que a probabilidade é zero para o estado enovelado e a probabilidade é um para o estado desenovelado. Esta condição inicial é incorporada ao gráfico (Fig. 6.5) e este ponto é ligado ao próximo ($t = 1$) onde o cálculo via probabilidade é efetivamente feito. Através do gráfico pode-se observar que para tempos menores a probabilidade é maior para o estado desenovelado e para tempos maiores a probabilidade é maior para o estado enovelado. Os resultados obtidos na Figura 6.5 possuem o mesmo comportamento geral daqueles encontrados em Jun & Weaver (2002) usando uma combinação de potenciais de poços quadrados.

Utilizando o mesmo formalismo apresentado para $D = 0,5$, foram realizados cálculos para outros valores do coeficiente de difusão ($D = 0,3; 0,4; 0,6; 0,8; 1; 1,2; 1,4; 1,6; 1,8; 2; 5$ e 10). Os resultados para os autovalores de energia, probabilidade de transição e probabilidade total estão no Apêndice V. Através destes resultados pode-se analisar vários aspectos para o problema de enovelamento de proteína.

Usando o número fixo de funções de onda na série que define a probabilidade de transição o tempo mínimo calculado variou para cada valor de D , para valores menores do coeficiente de difusão os tempos mínimos são maiores (para $D = 0,3$ o tempo mínimo é $t = 2,3$) e para valores maiores os tempos mínimos podem ser menores (para $D = 10$ o tempo mínimo é $t = 0,05$).

Foi usado um tempo característico para o estudo do processo de enovelamento. Optou-se por definir este tempo na condição em que metade da amostra está enovelada e a outra metade está desenovelada (t_{50}). Ele corresponde, portanto, ao ponto onde as curvas para a probabilidade total para os estados enovelado e desenovelado se cruzam. Observa-se que para coeficientes de difusão menores, maior foi o valor de t_{50} determinado. Este comportamento está mostrado na Tabela 6.2 e na Figura 6.6.

D	t_{50}	N_{enov}
0,3	2,75	0,97
0,4	2,25	0,95
0,5	2	0,92
0,6	1,75	0,89
0,8	1,50	0,84
1	1,25	0,80
1,2	1,15	0,78
1,4	1	0,76
1,6	0,95	0,74
1,8	0,90	0,72
2	0,85	0,71
5	0,50	0,64
10	0,35	0,61

Tabela 6.2: Resultados para t_{50} e N_{enov} para vários valores de D.

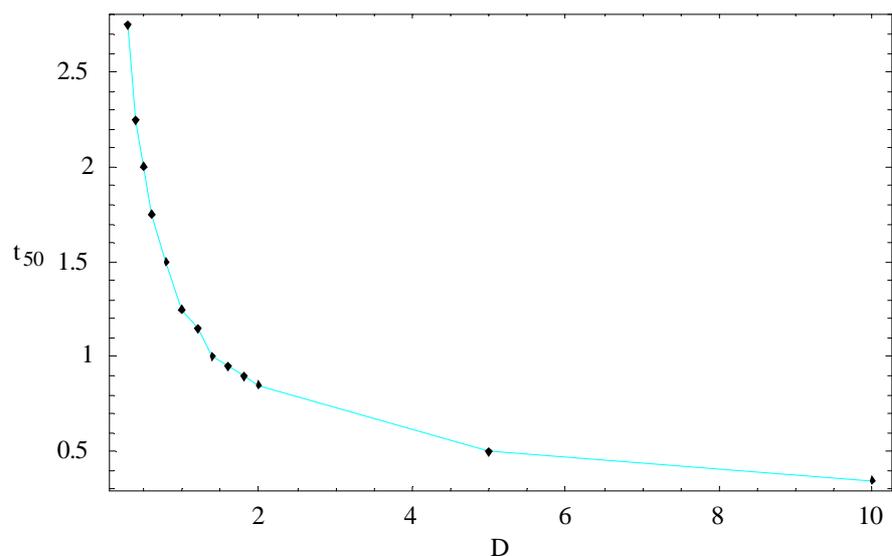


Figura 6.6: Relação entre os tempos t_{50} e os coeficientes de difusão.

Visando estudar a eficiência do processo de enovelamento buscou-se relacionar o coeficiente de difusão com as probabilidades totais para o estado enovelado (N_{enov}) no equilíbrio. Na Tabela 6.2 estão os valores calculados para as probabilidades totais em um tempo $t = 20$, para vários valores do coeficiente de difusão. A Figura 6.7 mostra a relação entre estas probabilidades totais e os coeficientes de difusão. Observa-se que a probabilidade total para o estado enovelado no equilíbrio é maior para os coeficientes menores e esta probabilidade é menor para os coeficientes maiores.

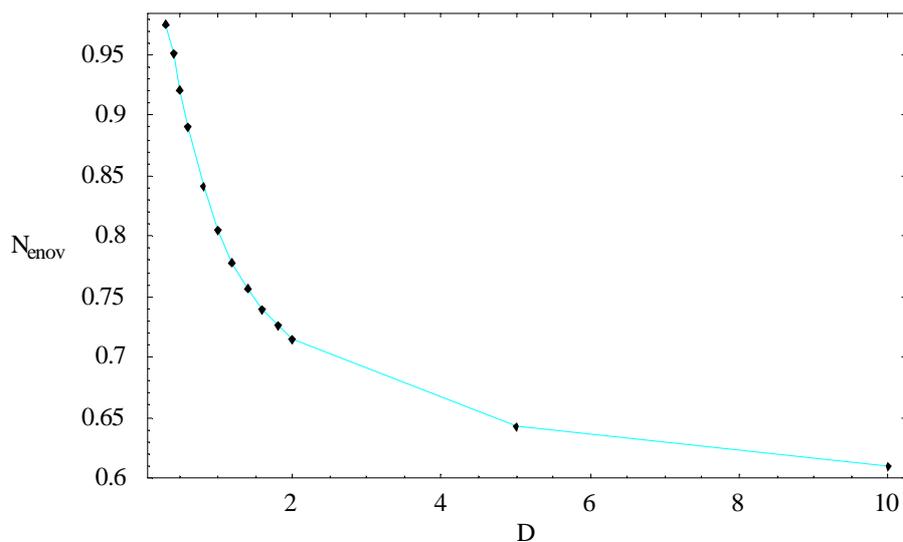


Figura 6.7: Relação entre as probabilidades totais para o estado enovelado e os coeficientes de difusão.

A fim de observar as características gerais de tempos de enovelamento e eficiência do processo, a Figura 6.8 mostra as curvas para as probabilidades totais para o estado enovelado para vários valores do coeficiente de difusão.

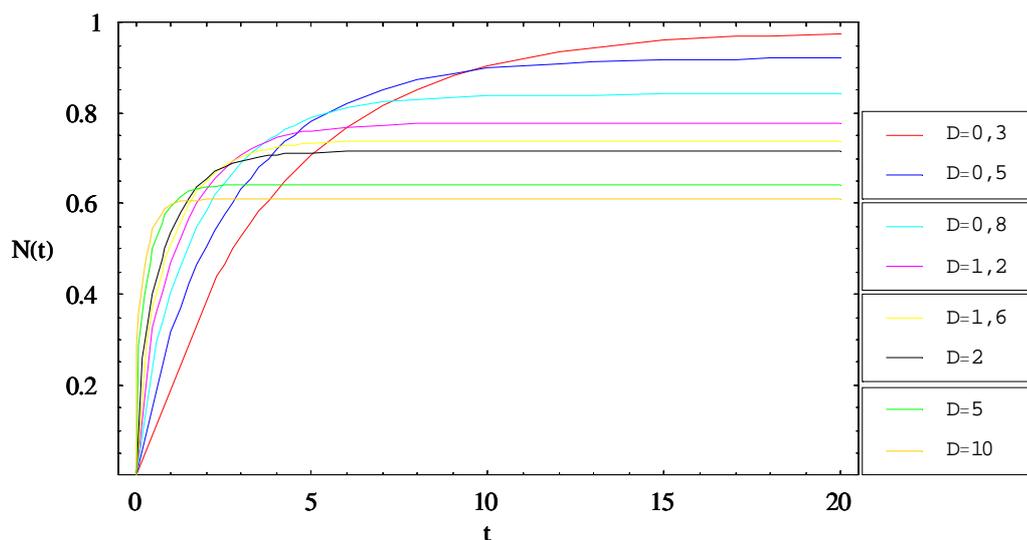


Figura 6.8: Comparação entre os gráficos para as probabilidades totais para o estado enovelado com vários valores para o coeficiente de difusão.

Através dos resultados para as probabilidades totais (vide Apêndice V) observa-se que para valores menores do coeficiente de difusão, o sistema demora mais tempo para se enovelar e entrar em equilíbrio, porém a probabilidade total para o sistema enovelado chega a 0,97 (Figura 6.8 para $D = 0,3$). Por outro lado, para valores maiores do coeficiente de difusão o sistema leva menos tempo para se enovelar e entrar em equilíbrio, porém a probabilidade total chega a apenas 0,61 (Figura 6.8 para $D = 10$).

Com o objetivo de melhorar este comportamento, ou seja diminuir a probabilidade total para o estado desenovelado e aumentar o tempo de enovelamento, construiu-se uma curva para a probabilidade total com coeficientes de difusão variando entre $D = 0,4$ e $D = 2$. Deste modo, é construída uma terceira curva, como mostra a Figura 6.9, onde foram utilizados os valores para as probabilidades totais no estado desenovelado obtidos com valores intermediários para o coeficiente de difusão.

O critério usado para variar o coeficiente de difusão foi considerar intervalos de 0,2 em 0,2. Iniciou-se com $D = 2$, truncou-se a curva quando o processo atingiu metade do tempo total de equilíbrio. Neste ponto, alterou-se o coeficiente de difusão para $D = 1,8$, novamente quando o processo atingiu metade do tempo total de equilíbrio o coeficiente de difusão foi alterado para $D = 1,6$. O processo foi repetido até $D = 0,4$, totalizando nove valores diferentes para o coeficiente de difusão (2; 1,8; 1,6; 1,4; 1,2; 1; 0,8; 0,6 e 0,4). A Figura 6.9 indica o resultado

final e as curvas limitantes para $D = 2$ e $D = 0,4$. Percebe-se que variando D é possível aliar um tempo menor a uma população maior de estados enovelados no equilíbrio.

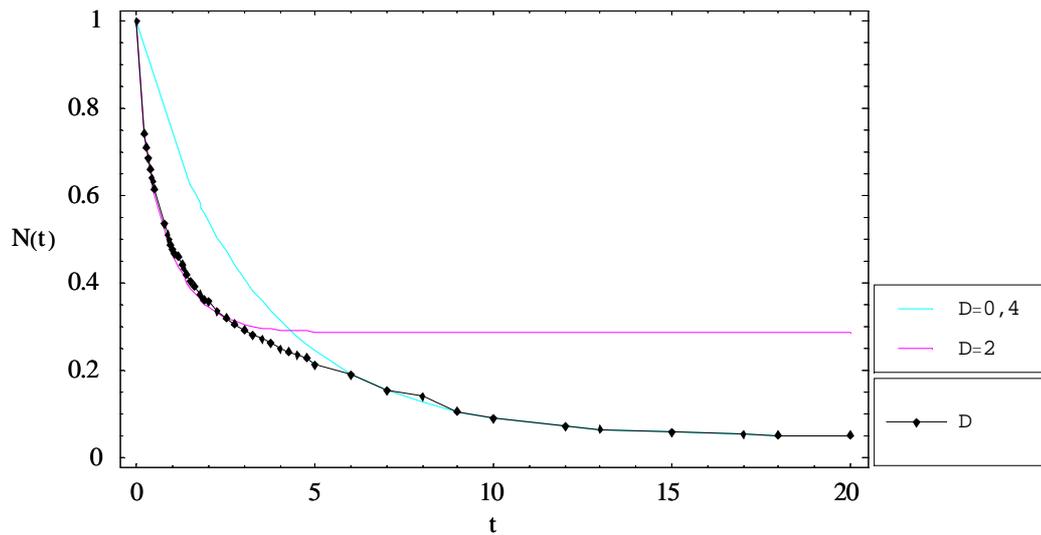


Figura 6.9: Probabilidade total para o estado desenovelado, variando o coeficiente de difusão.

DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

VII. DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

Neste trabalho foi utilizado o formalismo de supersimetria e método variacional para estudar estados excitados da equação de Schrödinger e as soluções da equação de Fokker-Planck.

Foi desenvolvido um método baseado no formalismo de supersimetria em Mecânica Quântica. Este formalismo permite a obtenção das funções de onda e autovalores de energia através da construção da hierarquia de Hamiltonianos. Para os potenciais não exatamente solúveis o formalismo supersimétrico pode ser utilizado na obtenção das funções de onda aproximadas, a serem usadas no método variacional. Deste modo, a abordagem proposta permite obter soluções aproximadas para as funções de onda e níveis de energia tanto para o estado fundamental como para os estados excitados.

A construção de uma hierarquia de Hamiltonianos efetivos através de superpotenciais sugeridos permite obter as funções de onda e os potenciais efetivos (Tabela 2.2). As funções de onda são utilizadas no método variacional para a obtenção dos autovalores do Hamiltoniano original. Os potenciais efetivos servem como um teste para o superpotencial sugerido, uma vez que se espera que quanto mais próximas forem as formas gráficas para o potencial original e o potencial efetivo melhores são os resultados obtidos para os autovalores de energia.

Como forma de avaliar a confiabilidade do procedimento proposto, este foi usado para a obtenção dos quatro primeiros níveis de

energia para o potencial $V(x) = -\gamma x^2 + x^4$. Os autovalores $E_0(V)$, $E_1(V)$, $E_2(V)$ e $E_3(V)$ foram comparados com resultados obtidos através de integração numérica, a comparação é apresentada nas Tabelas 2.3 e 2.4 onde observa-se uma boa concordância entre os resultados. Através dos valores encontrados foi possível adquirir confiabilidade no método proposto. O processo indicado é geral, podendo ser usado para outros potenciais de interesse. Nota-se que o procedimento sugerido permite usar o método variacional em estados excitados, usualmente apenas os estados fundamentais são tratados por este método. Este alargamento da aplicação do método o coloca como instrumento adicional no estudo de vários fenômenos físicos como por exemplo o tunelamento (Hecht, 2000), cuja taxa é proporcional à diferença entre os dois primeiros níveis de energia.

Com respeito a equação de Fokker-Planck, nota-se (Capítulo III) que ela pode ser associada a uma equação de Schrödinger. Assim, os métodos usados para a resolução da equação de Schrödinger (tais como o método variacional) também podem ser usados na resolução da equação de Fokker-Planck. Isto abriu caminho para o método introduzido neste trabalho.

O primeiro problema a ser abordado usando o formalismo descrito à equação de Fokker-Planck envolveu um potencial biestável, simétrico e unidimensional (Figura 4.1). Os resultados obtidos para os autovalores de energia e para a probabilidade de transição foram comparados com resultados encontrados na literatura (So & Liu, 2000).

Posteriormente, estudou-se um potencial biestável, assimétrico e unidimensional (Figura 5.1) onde novamente os resultados encontrados foram compatíveis com àqueles obtidos por outro método, no caso (SDD). Em ambos os casos foi analisada a ortogonalidade das funções de onda. Como esperado para os primeiros níveis de energia o produto interno das funções de onda é bem pequeno. Para o caso simétrico este produto é da ordem de 10^{-13} para os dois primeiros níveis de energia, ele cresce a medida que estes níveis aumentam chegando a 10^{-6} para o oitavo e nono estados. Para o caso assimétrico a ortogonalidade é menos evidente, os resultados para os produtos internos estão entre 10^{-6} e 10^{-1} .

Em relação ao potencial biestável simétrico, os resultados obtidos para os autovalores de energia (com $D = 0,5$) estão próximos aos encontrados através do método SDD e integração numérica (comparados na Tabela 4.1), assim como estão em concordância quanto a forma do gráfico de $P(x,t | 0,0)$ (Figura 4.3) mostrado por So & Liu (2000). Nesta referência foi necessário usar uma base com cem estados ($n = 100$) para o cálculo da probabilidade de transição. Por outro lado, no resultado utilizando o formalismo supersimétrico aliado ao método variacional foi utilizado apenas dez autoestados ($n = 9$).

Para o potencial biestável assimétrico, os resultados obtidos para os autovalores de energia estão próximos aos encontrados através do método SDD (Tabela 5.1). A forma gráfica obtida para a probabilidade de transição (Figura 5.3) também está em concordância com a apresentada no trabalho de So & Liu (2000).

O próximo passo foi encontrar um potencial que permitisse a aplicação do formalismo no estudo do enovelamento de proteína. Apesar do sistema físico ser bastante complexo, como indicado no Apêndice IV, o chamado modelo de funil permite uma grande simplificação tratando o processo de enovelamento por uma equação de Fokker-Planck em uma dimensão, usando uma coordenada de reação.

O potencial proposto (Figura 6.1) foi utilizado na equação de Fokker-Planck que foi analisada através do formalismo supersimétrico e método variacional. Pode-se observar que para o estado fundamental da equação de Schrödinger associada a solução é exata, o que sempre acontece devido a estrutura das equações envolvidas, porém para os estados excitados este potencial não é exatamente solúvel. Este estudo foi feito para vários valores do coeficiente de difusão ($D = 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,8; 1; 1,2; 1,4; 1,6; 1,8; 2; 5$ e 10).

Em relação aos autovalores de energia, o menor valor do coeficiente de difusão foi $D = 0,3$, para valores menores de D ocorreram problemas numéricos na minimização com a função de onda utilizada. Uma maneira de contornar estes problemas seria testar outras formas para o superpotencial sugerido no formalismo supersimétrico. Entretanto, para a análise realizada não houve a necessidade de buscar D menores. Uma maneira de ampliar os resultados para $D < 0,3$ é ajustar a curva mostrada na Figura 6.6 por uma soma de duas exponenciais e extrapolar os valores de t_{50} . Por outro lado, não há problemas em utilizar valores maiores para D .

No cálculo da probabilidade de transição observou-se um limite inferior de tempo para descrever a dinâmica do processo com o número fixado de autofunções variacionais. Quanto menor for o coeficiente de difusão maior tem que ser o valor para o primeiro tempo no cálculo da probabilidade, isto porque existe uma dependência com o termo \underline{D} ($\lambda_n = E_n \cdot D$) na exponencial da somatória usada para o cálculo da probabilidade de transição, equação (6.18). Para efeito dos resultados apresentados, esta limitação não foi relevante, podendo vir a ser importante para estudar efeitos ocorridos em tempos muito curtos.

No cálculo para as probabilidades totais dos estados enovelado e desenovelado, observa-se uma dependência entre os valores para os coeficientes de difusão e os tempos t_{50} (este tempo corresponde a população de proteínas estar 50% no estado enovelado e 50% no estado desenovelado). Pode ser visto que quanto menor for o coeficiente de difusão maior será o valor para este tempo. Em relação as probabilidades totais, observa-se também que a probabilidade total para o estado enovelado no equilíbrio é maior para os coeficientes de difusão menores e esta probabilidade diminui para valores maiores do coeficiente de difusão.

Há uma relação entre a probabilidade total no equilíbrio, o tempo de enovelamento e o coeficiente de difusão. Para valores menores do coeficiente de difusão o tempo de equilíbrio é maior, porém há uma alta probabilidade do sistema se encontrar no estado enovelado no equilíbrio. Por outro lado, para valores maiores do coeficiente de difusão o tempo de equilíbrio é menor, porém uma grande parte do sistema continua

desenvolvido no equilíbrio. Para melhorar este resultado é preciso variar o coeficiente de difusão durante o processo de enovelamento visando obter um tempo de equilíbrio menor com valor pequeno para a probabilidade total desenvolvida no equilíbrio (Figura 6.9).

Através dos resultados obtidos pode-se concluir que a metodologia utilizada é consistente, sendo compatível com resultados obtidos através de outros métodos.

Em relação ao problema de enovelamento de proteína, esta metodologia permite analisar vários aspectos deste sistema como as probabilidades de transição e as dependências com os coeficientes de difusão e os tempos característicos do processo. O método fornece soluções aproximadas, porém analíticas o que permite estudar diretamente a dinâmica do processo.

A metodologia proposta abre caminho para inúmeras aplicações. Em princípio, ela pode ser usada sempre que a descrição de um sistema requerer o uso da equação de Fokker-Planck, por exemplo, transferência de elétrons e transferência de prótons. No caso específico do enovelamento de proteína a abordagem mostra potencial para tratar outros aspectos do problema como estudo de estados intermediários (Jun & Weaver, 2002), ampliação dos resultados para coeficientes de difusão não constante e tratamento de potenciais confinados impondo um limite físico à coordenada de reação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

VIII. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BERNSTEIN, M.; BROWN, L. S. Supersymmetry and the bistable Fokker-Planck equation. *Physical Review Letters*, v. 52, n. 22, p. 1933-1935, 1984.

BORGES, G. R. P.; DRIGO, E. F. Supersimetria em mecânica quântica II: oscilador harmônico e potencial coulombiano. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 21, n. 2, p. 233-237, 1999.

BORGES, G. R. P.; DRIGO, E. F. Supersymmetry, variational method and the Lennard-Jones (12,6) potential. *International Journal of Modern Physics A*, v. 16, n. 27, p. 4401-4407, 2001.

BORGES, G. R. P. Estudo de potenciais quânticos através do método de fatorização. Dissertação (Mestrado em Biofísica Molecular) - Instituto de Biociências Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, São José do Rio Preto, 1999.

BRYNGELSON, J. D.; WOLYNES, P. G. Intermediates and barrier crossing in a random energy model (with applications to protein folding). *Journal of Physical Chemistry*, v. 93, n. 19, p. 6902-6915, 1989.

CAROLI, B.; CAROLI, C.; ROULET, B. Diffusion in a bistable potential: a systematic WKB treatment. *Journal of Statistical Physics*, v. 21, n. 4, p. 415-437, 1979.

CASTRO, A. S.; DUTRA, A. S. Approximate analytical states of a polynomial potential: an example of symmetry restoration. *Physics Letters A*, v. 269, p. 281-286, 2000.

COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum mechanics*. New York: John Wiley, 1977, p. 417-419.

COOPER, F.; KHARE, A.; SUKHATME, U. *Supersymmetry in quantum mechanics*. Singapore: World Scientific, 2001.

DRIGO, E. F.; RICOTTA, R. M. Morse potential energy spectra through the variational method and supersymmetry. *Physics Letters A*, v. 269, p. 269-276, 2000.

DRIGO, E. F.; RICOTTA, R. M. Supersymmetry, variational method and Hulthén potential. *Modern Physics Letters A*, v. 10, n. 22, p. 1613-1618, 1995.

DRIGO, E. F. Supersimetria em mecânica quântica. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 19, n. 1, p. 152-158, 1997.

GASIOROWICZ, S. *Quantum physics*. 2nd ed. New York: John Wiley, 1996, p. 302-305.

HARVEY, G.; TOBOCHNIK, J. *An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems*. 2nd ed. New York: Addison-Wesley, 1996, p. 631-632.

HECHT, K. T. *Quantum mechanics*. Heidelberg: Springer Verlag, 2000.

JUN, B.; WEAVER, D. L. One-dimensional potential barrier model of protein folding with intermediates. *Journal of Chemical Physics*, v. 116, n. 1, p. 418-426, 2002.

JUNKER, G. *Supersymmetric methods in quantum and statistical physics*. Berlin: Springer Verlag, 1996.

KEUNG, W. Y.; KOVACS, E.; SUKHATME, U. P. Supersymmetry and double-well potential. *Physical Review Letters*, v. 60, n. 1, p. 41-44, 1988.

NEUMAIER, A. Molecular modeling of proteins and mathematical prediction of protein structure. *SIAM Rev.*, v. 39, n. 3, p. 407-460, 1997.

ONUCHIC, J. N.; LUTHEY-SCHULTEN, Z.; WOLYNES, P. G. Theory of protein folding: the energy landscape perspective. *Annual Review of Physical Chemistry*, v. 48, p. 545-600, 1997.

RISKEN, H. *The Fokker-Planck equation: methods of solution and applications*. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1989.

SO, F.; LIU, K. L. A study of the Fokker-Planck equation of bistable systems by the method of state-dependent diagonalization. *Physica A*, v. 277, p. 335-348, 2000.

SOCCI, N. D.; ONUCHIC, J. N.; WOLYNES, P. G. Diffusive dynamics of the reaction coordinate for protein folding funnels. *Journal Chemical Physics*, v. 104, n. 15, p. 5860-5868, 1996.

TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. São Paulo: Edusp, 2001.

VOET, D.; VOET, J. G.; PRATT, C. W. *Fundamentos de bioquímica*. Porto Alegre: Artes Médicas Sul, 2000.

APÊNDICE I

APÊNDICE I

No item I.1 está descrito o processo de minimização para o potencial dado em (2.28), para o primeiro nível de energia em relação a dois parâmetros variacionais a e b. Tem-se a comparação gráfica para os potenciais original (2.28) e efetivo (2.33) para $\gamma = 0,5$ com os parâmetros a e b minimizados.

Mostram-se no item I.2 o procedimento de minimização para o segundo nível de energia em relação aos parâmetros variacionais c e d. Faz-se a comparação gráfica para os potenciais companheiro supersimétrico e efetivo dados em (2.38) e (2.40) com os parâmetros a, b, c e d minimizados.

Está descrito no item I.3 a rotina utilizada para os cálculos de integração numérica para o potencial original dado em (2.28).

I.1- Procedimento para a Minimização do Primeiro Nível de Energia e Comparação Gráfica para os Potenciais

Parâmetro:

$$\gamma := 0.5$$

Potencial original dado em (2.28):

$$V_0[x_] = -\gamma x^2 + x^4$$

$$-0.5 x^2 + x^4$$

Superpotencial dado em (2.32):

$$w_1[x_] = ax + bx^3$$

$$ax + bx^3$$

Potencial efetivo dado em (2.33) obtido através do superpotencial dado em (2.32):

$$V1[x_] = \text{Expand}[w_1[x]^2] - D[w_1[x], \{x, 1\}] + E0$$

$$-a + E0 + a^2 x^2 - 3 b x^2 + 2 a b x^4 + b^2 x^6$$

Função de onda dada em (2.34):

$$\Psi01[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_1[x] dx\right]$$

$$e^{-\frac{a x^2}{2} - \frac{b x^4}{4}}$$

Função de onda ao quadrado:

$$F0[x_] = \Psi01[x]^2$$

$$e^{-a x^2 - \frac{b x^4}{2}}$$

Função de onda vezes a derivada segunda da própria função:

$$F1[x_] = \Psi01[x] D[\Psi01[x], \{x, 2\}]$$

$$e^{-\frac{a x^2}{2} - \frac{b x^4}{4}} \left(e^{-\frac{a x^2}{2} - \frac{b x^4}{4}} (-a - 3 b x^2) + e^{-\frac{a x^2}{2} - \frac{b x^4}{4}} (-a x - b x^3)^2 \right)$$

Função de onda ao quadrado vezes o potencial original:

$$F2[x_] = F0[x] V0[x]$$

$$e^{-a x^2 - \frac{b x^4}{2}} (-0.5 x^2 + x^4)$$

Integração numérica da função de onda ao quadrado $F0[x]$ para x variando de -5 a 5:

```
I0:=NIntegrate[F0[x], {x, -5, 5}]
```

Integração numérica da função de onda vezes a derivada segunda da própria função $F1[x]$, para x variando de -5 a 5:

```
I1:=NIntegrate[F1[x], {x, -5, 5}]
```

Integração numérica da função de onda ao quadrado vezes o potencial original para x variando de -5 a 5:

```
I2:=NIntegrate[F2[x], {x, -5, 5}]
```

Expressão a ser minimizada em relação aos parâmetros variacionais a e b dada em (2.27):

$$E0 := \frac{-I1 + I2}{I0}$$

Comando utilizado para minimizar a expressão para $E0$ em relação aos parâmetros variacionais a e b :

```
FindMinimum[E0, {a, 0.85, 0.95}, {b, 0.31, 0.33}]
```

Resultados obtidos para o primeiro nível de energia e para os parâmetros variacionais:

$$E_0 := 0.8701810632007522'$$

$$a := 0.9125791326786703'$$

$$b := 0.3171471707336974'$$

Comparação gráfica para os potenciais original e efetivo:

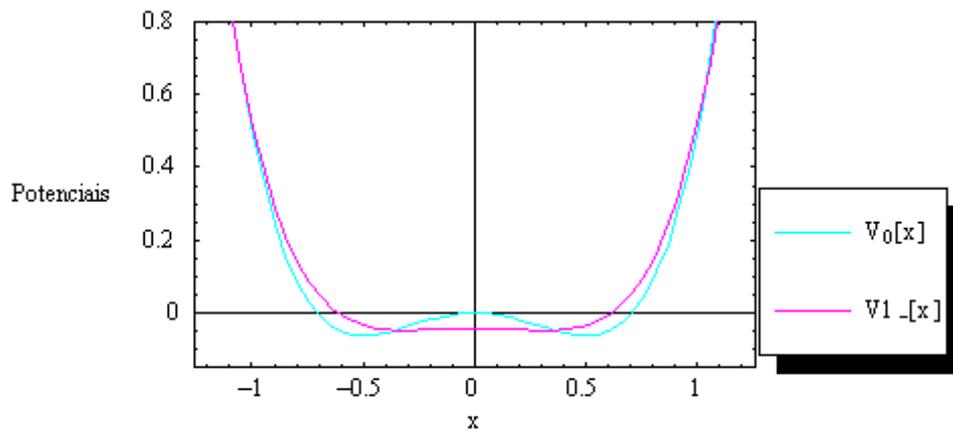


Figura I.1: Gráfico para a comparação entre os potenciais original e efetivo .

I.2- Procedimento para a Minimização do Segundo Nível de Energia e Comparação Gráfica para os Potenciais

Parâmetros variacionais minimizados e primeiro nível de energia:

$$a := 0.9125791326786703'$$

$$b := 0.3171471707336974'$$

$$E0 := 0.8701810632007522'$$

Superpotencial dado em (2.32):

$$w_1[x_] = ax + b x^3$$

$$0.912579 x + 0.317147 x^3$$

Potencial companheiro supersimétrico dado em (2.38) obtido através do superpotencial dado em (2.32):

$$V1+[x_] = \text{Expand}[w_1[x]^2] + D[w_1[x], \{x, 1\}] + E0$$

$$1.78276 + 1.78424 x^2 + 0.578844 x^4 + 0.100582 x^6$$

Superpotencial dado em (2.39):

$$w_2[x_] = cx + d x^3$$

$$c x + d x^3$$

Potencial efetivo dado em (2.40) obtido através do superpotencial dado em (2.39):

$$V2-[x_] = \text{Expand}[w_2[x]^2] - D[w_2[x], \{x, 1\}] + E1$$

$$-c + E1 + c^2 x^2 - 3 d x^2 + 2 c d x^4 + d^2 x^6$$

Função de onda dada em (2.41):

$$\Psi_0[x] = \text{Exp}\left[-\int \Psi_2[x] dx\right]$$

$$e^{-\frac{c x^2}{2} - \frac{d x^4}{4}}$$

Função de onda ao quadrado:

$$G_0[x] = \Psi_0[x]^2$$

$$e^{-c x^2 - \frac{d x^4}{2}}$$

Função de onda vezes a derivada segunda da própria função:

$$G_1[x] = \Psi_0[x] D[\Psi_0[x], \{x, 2\}]$$

$$e^{-\frac{c x^2}{2} - \frac{d x^4}{4}} \left(e^{-\frac{c x^2}{2} - \frac{d x^4}{4}} (-c - 3 d x^2) + e^{-\frac{c x^2}{2} - \frac{d x^4}{4}} (-c x - d x^3)^2 \right)$$

Função de onda ao quadrado vezes o potencial companheiro supersimétrico:

$$G_2[x] = G_0[x] V_+[x]$$

$$e^{-c x^2 - \frac{d x^4}{2}} (1.78276 + 1.78424 x^2 + 0.578844 x^4 + 0.100582 x^6)$$

Integração numérica da função de onda ao quadrado $G_0[x]$ para x variando de -5 a 5:

$$J_0 := \text{NIntegrat}\{G_0[x], \{x, -5, 5\}\}$$

Integração numérica da função de onda vezes a derivada segunda da própria função $G_1[x]$, para x variando de -5 a 5:

$$J_1 := \text{NIntegrat}\{G_1[x], \{x, -5, 5\}\}$$

Integração numérica da função de onda ao quadrado vezes o potencial companheiro supersimétrico para x variando de -5 a 5:

$$J_2 := \text{NIntegrat}\{G_2[x], \{x, -5, 5\}\}$$

Expressão a ser minimizada em relação aos parâmetros variacionais c e d dada em (2.27):

$$E1 := \frac{-J1 + J2}{J0}$$

Comando utilizado para minimizar a expressão para E1 em relação aos parâmetros variacionais c e d:

```
FindMinimum[E1, {c, 1.46, 1.58}, {d, 0.22, 0.24}]
```

Resultados obtidos para o segundo nível de energia e para os parâmetros variacionais:

```
E1 := 3.3363563003186307`
```

```
c := 1.543615318501402`
```

```
d := 0.23786677662974082`
```

Comparação gráfica para os potenciais dados em (2.38) e (2.40):

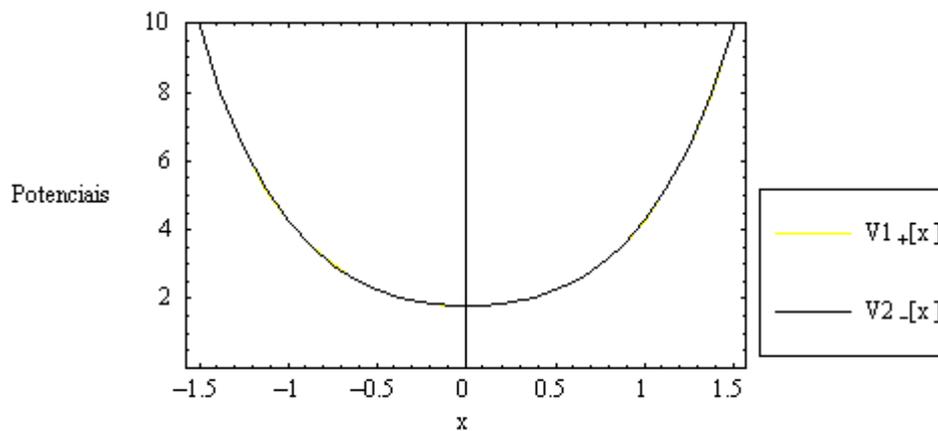


Figura I.2: Gráfico para a comparação entre os potenciais .


```

100 print *, ' entre com um novo valor da energia E '
    read(*,*) E
    if (E.eq .0) goto 200
    if (iparity.eq.-1) then
        phi = 0.0
        dphi = 1.0
    else
        phi = 1.0
        dphi = 0.0
    end if
    x = 0.0
150 x_old = x
    x = x + dx
c    d2phi = 2 * (V (x, V0, a) - E) * phi
    d2phi = (V (x, V0, a) - E) * phi
    dphi = dphi + d2phi * dx
    phi = phi + dphi * dx
    if (x.le.xmax) goto 150
    write (*, ' (f8.5,e30.2) ') x, phi
    goto 100
200 return
    end
c *****
function V (x,V0,a)
c *****
implicit real*8 (a-h,o-z)
V=-V0*x**2+x**4
c If (dabs (x).gt.a) then
c v=v0
c else
c v=0.0
c end if
end
end

```

APÊNDICE II

APÊNDICE II

Neste apêndice estão demonstrados os cálculos referentes ao potencial biestável simétrico estudado no Capítulo IV. São calculadas as funções de onda no estado fundamental para cada Hamiltoniano (como mostrado na Tabela 2.2) com os parâmetros variacionais minimizados. São apresentados os cálculos para a obtenção das funções de onda para o primeiro Hamiltoniano (como mostrado na Tabela 2.1) e os cálculos da constante de normalização. Finalmente, mostram-se os cálculos necessários para a probabilidade de transição para quatro valores diferentes de t e a representação gráfica referente a este cálculo.

Parâmetros utilizados para o estado fundamental de energia:

$$a_1 := -1$$

$$b_1 := 1$$

Superpotencial dado em (4.7) considerando $f=1$:

$$w_1[x_] = a_1 x + b_1 x^3$$

$$-x + x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o primeiro Hamiltoniano dada em (4.9):

$$\Psi_{01}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_1[x] dx\right]$$

$$e^{-\frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4}}$$

Cálculos necessários para a constante de normalização para a função de onda no estado fundamental.

$$T0 = \Psi01[x]^2$$

$$e^{x^2 - \frac{x^4}{2}}$$

$$N\text{Integrat}\{T0, \{x, -\infty, \infty\}\}$$

$$4.16575$$

$$N0 = \sqrt{\frac{1}{4.165748068945849}}$$

$$0.489952$$

Função de onda normalizada no estado fundamental.

$$\Psi0[x_] = N0 \Psi01[x]$$

$$0.489952 e^{\frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{4}}$$

Gráfico para a função de onda $\Psi0[x]$.

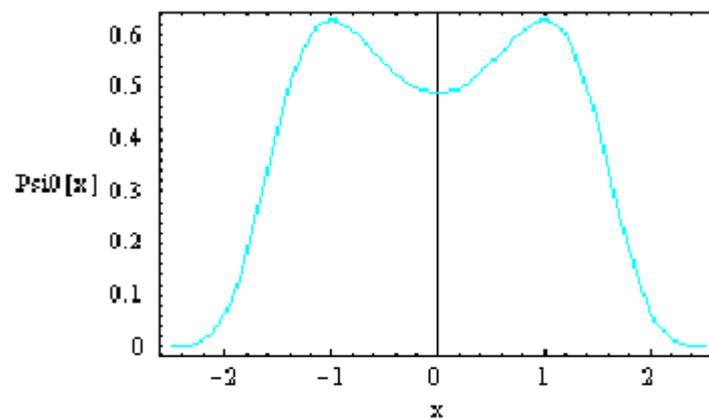


Figura II.1: Gráfico para a função de onda no estado fundamental.

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o primeiro estado excitado:

$$a_2 := 1.6889125135476386'$$

$$b_2 := 0.28560375697476637'$$

Superpotencial dado em (4.14) considerando $f=1$:

$$w_2[x_] = a_2 x + b_2 x^3$$

$$1.68891 x + 0.285604 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o segundo Hamiltoniano dada em (4.16):

$$\Psi_2[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_2[x] dx\right]$$

$$e^{-0.844456x^2 - 0.0714009x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o segundo estado excitado:

$$a_3 := 2.0990317338060374'$$

$$b_3 := 0.24474099119500187'$$

Superpotencial:

$$w_3[x_] = a_3 x + b_3 x^3$$

$$2.09903 x + 0.244741 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o terceiro Hamiltoniano:

$$\Psi_3[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_3[x] dx\right]$$

$$e^{-1.04952x^2 - 0.0611852x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o terceiro estado excitado:

$$a_4 := 2.404864573515391'$$

$$b_4 := 0.21998614735633254'$$

Superpotencial:

$$w_4[x_] = a_4 x + b_4 x^3$$

$$2.40486 x + 0.219986 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o quarto Hamiltoniano:

$$\Psi_{04}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_4[x] dx\right]$$

$$e^{-1.20243x^2 - 0.0549965x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o quarto estado excitado:

$$a_5 := 2.653754427102259'$$

$$b_5 := 0.20277165875353279'$$

Superpotencial:

$$w_5[x_] = a_5 x + b_5 x^3$$

$$2.65375 x + 0.202772 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o quinto Hamiltoniano:

$$\Psi_{05}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_5[x] dx\right]$$

$$e^{-1.32688x^2 - 0.0506929x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o quinto estado excitado:

$$a_6 := 2.8660938202969675'$$

$$b_6 := 0.18983744454460502'$$

Superpotencial:

$$w_6[x_] = a_6 x + b_6 x^3$$

$$2.86609 x + 0.189837 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o sexto Hamiltoniano:

$$\Psi_{06}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_6[x] dx\right]$$

$$e^{-1.43305x^2 - 0.0474594x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o sexto estado excitado:

$$a_7 := 3.052704079073784'$$

$$b_7 := 0.17962146907848878'$$

Superpotencial:

$$w_7[x_] = a_7 x + b_7 x^3$$

$$3.0527 x + 0.179621 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o sétimo Hamiltoniano:

$$\Psi_{07}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_7[x] dx\right]$$

$$e^{-1.52635x^2 - 0.0449054x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o sétimo estado excitado:

$$a_8 := 3.2200785987703697$$

$$b_8 := 0.1712667474611804$$

Superpotencial:

$$w_8[x_] = a_8 x + b_8 x^3$$

$$3.22008 x + 0.171267 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o oitavo Hamiltoniano:

$$\Psi_{08}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_8[x] dx\right]$$

$$e^{-1.61004x^2 - 0.0428167x^4}$$

Parâmetros variacionais utilizados na minimização de energia para o oitavo estado excitado:

$$a_9 := 3.372449230942855$$

$$b_9 := 0.16425364469685$$

Superpotencial:

$$w_9[x_] = a_9 x + b_9 x^3$$

$$3.37245 x + 0.164254 x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o nono Hamiltoniano:

$$\Psi_{09}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_9[x] dx\right]$$

$$e^{-1.68622x^2 - 0.0410634x^4}$$

Cálculos para a obtenção da função de onda no primeiro estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{11}[x_] = -D[\Psi_{02}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{02}[x]$$

$$\text{Simplify}[\Psi_{11}[x]]$$

$$1.2856 e^{-0.0714009x^2} (11.827 + x^2) x (0.535867 + x^2)$$

$$\Psi_{11}[0]$$

$$0$$

Gráfico para a função de onda $\Psi_{11}[x]$.

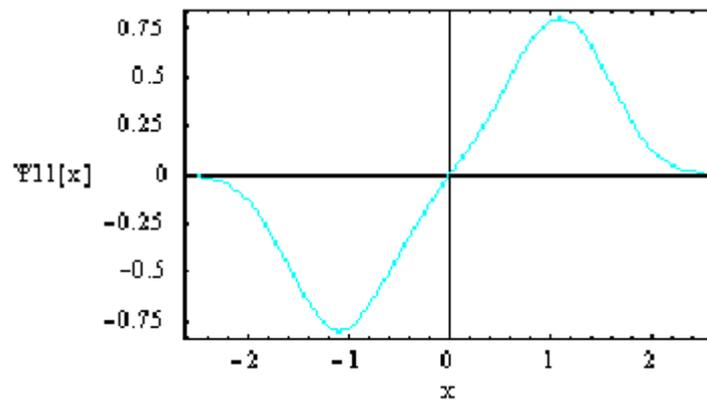


Figura II.2: Gráfico para a função de onda no primeiro estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no segundo estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{12}[x] = -D[\Psi_{03}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{03}[x]$$

$$\Psi_{21}[x] = -D[\Psi_{12}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{12}[x]$$

Simplify[\Psi_{21}[x]]

$$e^{-0.0611852x^2 (17.1531+x^2)} (-3.78794 + 2.57204 x^2 + 5.29788 x^4 + 0.660142 x^6)$$

Cálculos necessários para a constante de normalização para a função de onda no segundo estado excitado.

$$T2 = \Psi_{21}[x]^2$$

Simplify[T2]

$$e^{-0.12237x^2 (17.1531+x^2)} (14.3485 - 19.4855 x^2 - 33.5207 x^4 + 22.2515 x^6 + 31.4633 x^8 + 6.9947 x^{10} + 0.435787 x^{12})$$

NIntegrate[T2, {x, -∞, ∞}]

21.121

$$N2 = \sqrt{\frac{1}{21.12101004697045}}$$

0.217592

Função de onda normalizada.

$$\Psi_2[x] = N_2 \Psi_{21}[x]$$

`Simplify[Psi2[x]]`

$$e^{-0.0611852x^2(17.1531+x^2)}(-0.824226 + 0.559654 x^2 + 1.15277 x^4 + 0.143641 x^6)$$

Gráfico para a função de onda $\Psi_2[x]$.

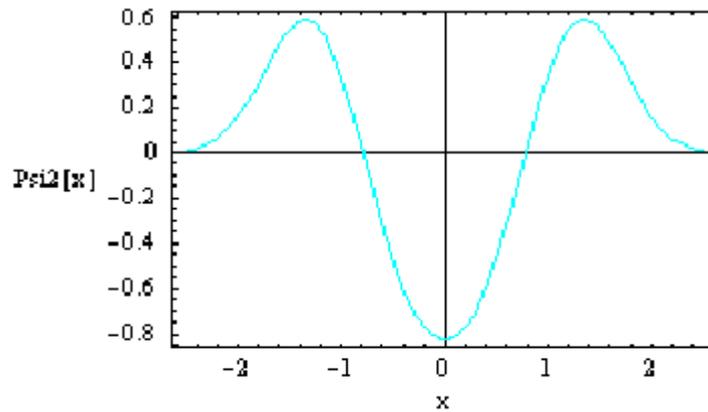


Figura II.3: Gráfico para a função de onda no segundo estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no terceiro estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{13}[x_] = -D[\Psi_{04}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{04}[x]$$

$$\Psi_{22}[x_] = -D[\Psi_{13}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{13}[x]$$

$$\Psi_{31}[x_] = -D[\Psi_{22}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{22}[x]$$

Simplify[Ψ31[x]]

$$e^{-0.0549965x^2 (21.8638 + x^2)} (-40.4149 x + 1.73104 x^3 + 25.2552 x^5 + 5.42916 x^7 + 0.28665 x^9)$$

Ψ31[0]

0

Gráfico para a função de onda $\Psi_{31}[x]$.

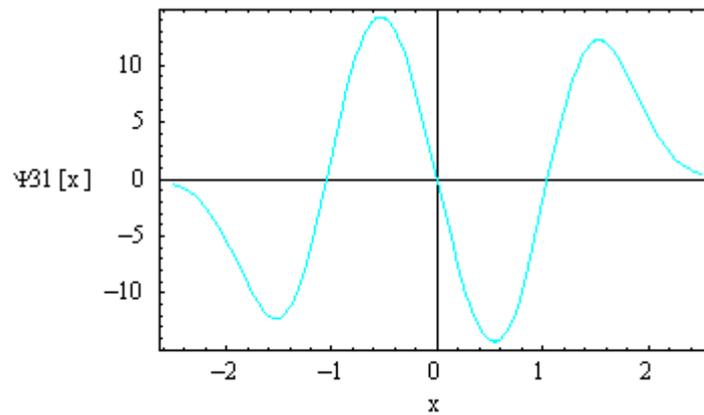


Figura II.4: Gráfico para a função de onda no terceiro estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no quarto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

```

Ψ14[x_] = -D[Ψ05[x], {x, 1}] + w4[x] Ψ05[x]
Ψ23[x_] = -D[Ψ14[x], {x, 1}] + w3[x] Ψ14[x]
Ψ32[x_] = -D[Ψ23[x], {x, 1}] + w2[x] Ψ23[x]
Ψ41[x_] = -D[Ψ32[x], {x, 1}] + w1[x] Ψ32[x]

Simplify[Ψ41[x]]

e-0.0506929x2 (26.1748+x2) (67.5164 - 349.67 x2 - 92.7198 x4 + 122.271 x6 + 38.31 x8 + 3.651 x10 + 0.111131 x12)

```

Cálculos necessários para a constante de normalização para a função de onda no quarto estado excitado.

```

T4 = Ψ41[x]2

Simplify[T4]

e-0.101386x2 (26.1748+x2) (4558.47 - 47217. x2 + 109749. x4 + 81353.3 x6 - 71739. x8 - 48972.6 x10 +
5307.73 x12 + 8613.64 x14 + 2339.87 x16 + 306.916 x18 + 21.8446 x20 + 0.811477 x22 + 0.01235 x24)

NIntegrate[T4, {x, -∞, ∞}]

10142.2

N4 = √(1 / 10142.175487526674)

0.00992966

```

Função de onda normalizada.

$$\text{Psi4}[x_] = \text{N4} \Psi_{41}[x]$$

`Simplify[Psi4[x]]`

$$e^{-0.0506929x^2} (26.1748 + x^2) (0.670415 - 3.47211 x^2 - 0.920676 x^4 + 1.21411 x^6 + 0.380405 x^8 + 0.0362532 x^{10} + 0.00110349 x^{12})$$

Gráfico para a função de onda Psi4[x].

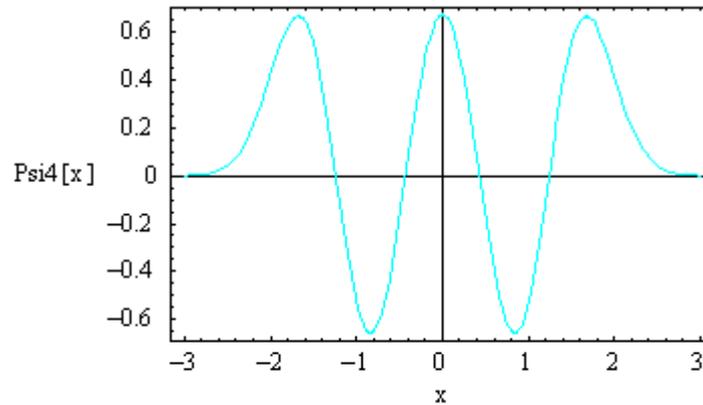


Figura II.5: Gráfico para a função de onda no quarto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no quinto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{15}[x] = -D[\Psi_{06}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{06}[x]$$

$$\Psi_{24}[x] = -D[\Psi_{15}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{15}[x]$$

$$\Psi_{33}[x] = -D[\Psi_{24}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{24}[x]$$

$$\Psi_{42}[x] = -D[\Psi_{33}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{33}[x]$$

$$\Psi_{51}[x] = -D[\Psi_{42}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{42}[x]$$

Simplify[Ψ51[x]]

$$e^{-0.0474594x^2} (30.1952 + x^2) (1626.98 x - 2628.41 x^3 - 1363.18 x^5 + 534.095 x^7 + 256.676 x^9 + 34.8409 x^{11} + 1.95781 x^{13} + 0.0395558 x^{15})$$

Ψ51[0]

0

Gráfico para a função de onda Ψ51[x].

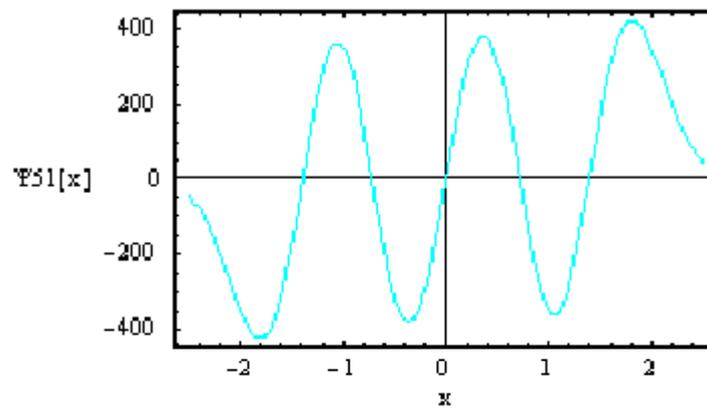


Figura II.6: Gráfico para a função de onda no quinto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no sexto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{16}[x] = -D[\Psi_{07}[x], \{x, 1\}] + w_6[x] \Psi_{07}[x]$$

$$\Psi_{25}[x] = -D[\Psi_{16}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{16}[x]$$

$$\Psi_{34}[x] = -D[\Psi_{25}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{25}[x]$$

$$\Psi_{43}[x] = -D[\Psi_{34}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{34}[x]$$

$$\Psi_{52}[x] = -D[\Psi_{43}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{43}[x]$$

$$\Psi_{61}[x] = -D[\Psi_{52}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{52}[x]$$

Simplify[\Psi_{61}[x]]

$$e^{-0.0449054x^2 (33.9904+x^2)} (-2419.53 + 25879.6 x^2 - 16210.5 x^4 - 14465. x^6 + 1476.46 x^8 + 1638.18 x^{10} + 297.928 x^{12} + 23.8674 x^{14} + 0.902894 x^{16} + 0.0131478 x^{18})$$

Cálculos necessários para a constante de normalização para a função de onda no sexto estado excitado.

$$T6 = \Psi_{61}[x]^2$$

Simplify[T6]

$$e^{-0.0898107x^2 (33.9904+x^2)}$$

$$(5.85413 \times 10^6 - 1.25233 \times 10^6 x^2 + 7.48195 \times 10^6 x^4 - 7.69046 \times 10^6 x^6 - 4.93059 \times 10^6 x^8 + 5.37464 \times 10^6 x^{10} + 2.44717 \times 10^6 x^{12} - 8.05205 \times 10^7 x^{14} - 5.36407 \times 10^7 x^{16} - 4.50878 \times 10^6 x^{18} + 2.8443 \times 10^6 x^{20} + 1.02005 \times 10^6 x^{22} + 169245. x^{24} + 17218.5 x^{26} + 1150.72 x^{28} + 50.9336 x^{30} + 1.44283 x^{32} + 0.0237421 x^{34} + 0.000172864 x^{36})$$

NIntegrate[T6, {x, -∞, ∞}]

$$1.70475 \times 10^7$$

$$N6 = \sqrt{\frac{1}{1.7047537728888713 \cdot 10^7}}$$

$$0.000242197$$

Função de onda normalizada.

$$\Psi_6[x] = N_6 \Psi_6[x]$$

Simplify[Psi6[x]]

$$e^{-0.0449054x^2} (33.9904 + x^2) (-0.586004 + 6.26796 x^2 - 3.92615 x^4 - 3.50338 x^6 + 0.357595 x^8 + 0.396762 x^{10} + 0.0721573 x^{12} + 0.00578062 x^{14} + 0.000218678 x^{16} + 3.18436 \times 10^{-6} x^{18})$$

Gráfico para a função de onda Psi6[x].

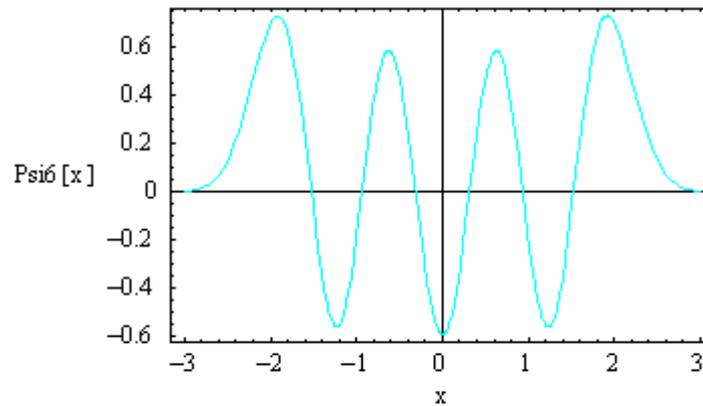


Figura II.7: Gráfico para a função de onda no sexto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no sétimo estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{17}[x_] = -D[\Psi_{08}[x], \{x, 1\}] + w_7[x] \Psi_{08}[x]$$

$$\Psi_{26}[x_] = -D[\Psi_{17}[x], \{x, 1\}] + w_6[x] \Psi_{17}[x]$$

$$\Psi_{35}[x_] = -D[\Psi_{26}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{26}[x]$$

$$\Psi_{44}[x_] = -D[\Psi_{35}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{35}[x]$$

$$\Psi_{53}[x_] = -D[\Psi_{44}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{44}[x]$$

$$\Psi_{62}[x_] = -D[\Psi_{53}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{53}[x]$$

$$\Psi_{71}[x_] = -D[\Psi_{62}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{62}[x]$$

Simplify[\Psi71[x]]

$$e^{-0.0428167x^2 (37.6031+x^2)} (-96127.7 x + 334850. x^3 - 57584.9 x^5 - 133077. x^7 - 7268.26 x^9 + 9626.17 x^{11} + 2387.6 x^{13} + 249.809 x^{15} + 13.5283 x^{17} + 0.372491 x^{19} + 0.00412786 x^{21})$$

\Psi71[0]

0

Gráfico para a função de onda $\Psi_{71}[x]$.

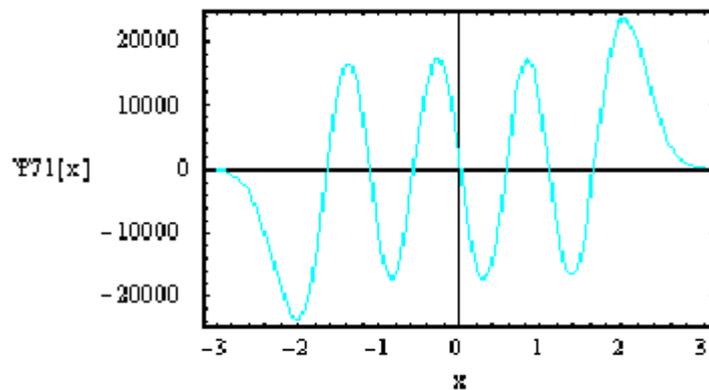


Figura II.8: Gráfico para a função de onda no sétimo estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no oitavo estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{18}[x] = -D[\Psi_{09}[x], \{x, 1\}] + w_8[x] \Psi_{09}[x]$$

$$\Psi_{27}[x] = -D[\Psi_{18}[x], \{x, 1\}] + w_7[x] \Psi_{18}[x]$$

$$\Psi_{36}[x] = -D[\Psi_{27}[x], \{x, 1\}] + w_6[x] \Psi_{27}[x]$$

$$\Psi_{45}[x] = -D[\Psi_{36}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{36}[x]$$

$$\Psi_{54}[x] = -D[\Psi_{45}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{45}[x]$$

$$\Psi_{63}[x] = -D[\Psi_{54}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{54}[x]$$

$$\Psi_{72}[x] = -D[\Psi_{63}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{63}[x]$$

$$\Psi_{81}[x] = -D[\Psi_{72}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{72}[x]$$

$$\text{Simplify}[\Psi_{81}[x]]$$

$$e^{-0.0410634x^2} (41.0639x^2) (136849. -2.32184 \times 10^6 x^2 + 3.72516 \times 10^6 x^4 + 434892. x^6 - 1.09627 \times 10^6 x^8 - 193149. x^{10} + 47017.3 x^{12} + 18055.2 x^{14} + 2398.84 x^{16} + 168.507 x^{18} + 6.6703 x^{20} + 0.140785 x^{22} + 0.00123416 x^{24})$$

Cálculos necessários para a constante de normalização para a função de onda no oitavo estado excitado.

$$T8 = \Psi_{81}[x]^2$$

$$\text{Simplify}[T8]$$

$$e^{-0.0821268x^2} (41.0639x^2) \left((136849. -2.32184 \times 10^6 x^2 + 3.72516 \times 10^6 x^4 + 434892. x^6 - 1.09627 \times 10^6 x^8 - 193149. x^{10} + 47017.3 x^{12} + 18055.2 x^{14} + 2398.84 x^{16} + 168.507 x^{18} + 6.6703 x^{20} + 0.140785 x^{22} + 0.00123416 x^{24})^2 \right)$$

$$\text{NIntegrate}[T8, \{x, -\infty, \infty\}]$$

$$6.75404 \times 10^{10}$$

$$N8 = \sqrt{\frac{1}{6.754039653285237 \times 10^{10}}}$$

$$3.84785 \times 10^{-6}$$

Função de onda normalizada.

$$\Psi_8[x] = N_8 \Psi_8[x]$$

Simplify[Psi8[x]]

$$e^{-0.0410634x^2} (41.0639 + x^2) (0.526575 - 8.93409 x^2 + 14.3339 x^4 + 1.6734 x^6 - 4.21829 x^8 - 0.743207 x^{10} + 0.180916 x^{12} + 0.0694739 x^{14} + 0.00923037 x^{16} + 0.00064839 x^{18} + 0.0000256663 x^{20} + 5.4172 \times 10^{-7} x^{22} + 4.74888 \times 10^{-9} x^{24})$$

Gráfico para a função de onda Psi8[x].

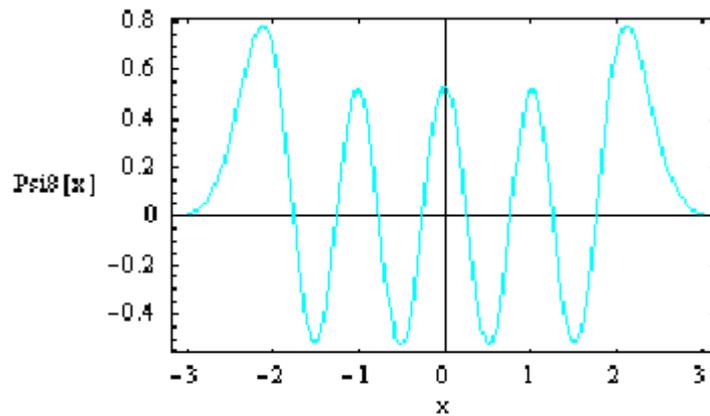


Figura II.9: Gráfico para a função de onda no oitavo estado excitado.

Autovalores obtidos pelo formalismo supersimétrico aliado ao método variacional apresentados na Tabela 4.1:

```
 $\lambda_0 := 0$   
 $\lambda_1 := 0.4238512412915086`$   
 $\lambda_2 := 2.319117276699212`$   
 $\lambda_3 := 4.571588082395491`$   
 $\lambda_4 := 7.101164707926714`$   
 $\lambda_5 := 9.861244966518658`$   
 $\lambda_6 := 12.820743565313656`$   
 $\lambda_7 := 15.957202729725434`$   
 $\lambda_8 := 19.253515086866468`$ 
```

Expressão utilizada para o cálculo da probabilidade de transição dada em (3.13).

$$P[x_-, t_-] := \text{Exp}[0.5 x^2 - 0.25 x^4] \{ \{ \text{Psi}0[x] \text{Psi}0[0] \text{Exp}[-\lambda_0 t] \} + \{ \Psi11[x] \Psi11[0] \text{Exp}[-\lambda_1 t] \} + \{ \text{Psi}2[x] \text{Psi}2[0] \text{Exp}[-\lambda_2 t] \} + \{ \Psi31[x] \Psi31[0] \text{Exp}[-\lambda_3 t] \} + \{ \text{Psi}4[x] \text{Psi}4[0] \text{Exp}[-\lambda_4 t] \} + \{ \Psi51[x] \Psi51[0] \text{Exp}[-\lambda_5 t] \} + \{ \text{Psi}6[x] \text{Psi}6[0] \text{Exp}[-\lambda_6 t] \} + \{ \Psi71[x] \Psi71[0] \text{Exp}[-\lambda_7 t] \} + \{ \text{Psi}8[x] \text{Psi}8[0] \text{Exp}[-\lambda_8 t] \} \}$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=0,3.

$$P1 := P[x, 0.3]$$

Simplify[P1]

$$\left\{ \left\{ e^{-0.697847x^2} (7.29239+x^2) \left(0.240053 e^{0.197847x^2} (30.7762+x^2) + \right. \right. \right. \\ e^{0.386662x^2} (11.7401+x^2) (0.338796 - 0.230045 x^2 - 0.473845 x^4 - 0.0590435 x^6) + \\ e^{0.397154x^2} (10.7316+x^2) (0.0533935 - 0.276527 x^2 - 0.073325 x^4 + \\ 0.0966947 x^6 + 0.0302964 x^8 + 0.0028873 x^{10} + 0.0000878847 x^{12}) + \\ e^{0.402942x^2} (10.0824+x^2) (0.00733512 - 0.0784572 x^2 + 0.0491443 x^4 + 0.0438525 x^6 - 0.00447609 x^8 - \\ 0.00496634 x^{10} - 0.000903207 x^{12} - 0.0000723571 x^{14} - 2.73724 \times 10^{-6} x^{16} - 3.98592 \times 10^{-8} x^{18}) + \\ e^{0.406784x^2} (9.59416+x^2) (0.000859827 - 0.0145882 x^2 + 0.0234053 x^4 + 0.00273244 x^6 - \\ 0.00688792 x^8 - 0.00121356 x^{10} + 0.000295412 x^{12} + 0.000113442 x^{14} + 0.000015072 x^{16} + \\ \left. \left. \left. 1.05874 \times 10^{-6} x^{18} + 4.19097 \times 10^{-8} x^{20} + 8.84557 \times 10^{-10} x^{22} + 7.7543 \times 10^{-12} x^{24} \right) \right\} \right\}$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=0,9.

$$P2 := P[x, 0.9]$$

Simplify[P2]

$$\left\{ \left\{ e^{-0.697847x^2} (7.29239+x^2) \left(0.240053 e^{0.197847x^2} (30.7762+x^2) + \right. \right. \right. \\ e^{0.386662x^2} (11.7401+x^2) (0.0842618 - 0.0572142 x^2 - 0.11785 x^4 - 0.0146847 x^6) + \\ e^{0.397154x^2} (10.7316+x^2) (0.000753513 - 0.00390247 x^2 - 0.00103479 x^4 + \\ 0.0013646 x^6 + 0.000427556 x^8 + 0.0000407468 x^{10} + 1.24027 \times 10^{-6} x^{12}) + \\ e^{0.402942x^2} (10.0824+x^2) (3.34673 \times 10^{-6} - 0.0000357969 x^2 + 0.0000224226 x^4 + \\ 0.0000200082 x^6 - 2.04226 \times 10^{-6} x^8 - 2.26595 \times 10^{-6} x^{10} - 4.12098 \times 10^{-7} x^{12} - \\ 3.30137 \times 10^{-8} x^{14} - 1.24889 \times 10^{-9} x^{16} - 1.81862 \times 10^{-11} x^{18}) + \\ e^{0.406784x^2} (9.59416+x^2) (8.26788 \times 10^{-9} - 1.40276 \times 10^{-7} x^2 + 2.2506 \times 10^{-7} x^4 + 2.62745 \times 10^{-8} x^6 - \\ 6.62324 \times 10^{-8} x^8 - 1.16693 \times 10^{-8} x^{10} + 2.8406 \times 10^{-9} x^{12} + 1.09083 \times 10^{-9} x^{14} + 1.44928 \times 10^{-10} x^{16} + \\ \left. \left. \left. 1.01805 \times 10^{-11} x^{18} + 4.02993 \times 10^{-13} x^{20} + 8.50567 \times 10^{-15} x^{22} + 7.45633 \times 10^{-17} x^{24} \right) \right\} \right\}$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=1,2.

P3 := P[x, 1,2]

Simplify[P3]

$$\left\{ \left\{ e^{-0.697847x^2} (7.29239+x^2) \left(0.240053 e^{0.197847x^2} (30.7762+x^2) + \right. \right. \right. \\ e^{0.386662x^2} (11.7401+x^2) (0.042022 - 0.0285332 x^2 - 0.0587726 x^4 - 0.00732336 x^6) + \\ e^{0.397154x^2} (10.7316+x^2) (0.0000895142 - 0.000463597 x^2 - 0.000122929 x^4 + \\ 0.000162109 x^6 + 0.0000507918 x^8 + 4.84055 \times 10^{-6} x^{10} + 1.47338 \times 10^{-7} x^{12}) + \\ e^{0.402942x^2} (10.0824+x^2) (7.14869 \times 10^{-6} - 7.64632 \times 10^{-7} x^2 + 4.78953 \times 10^{-7} x^4 + \\ 4.2738 \times 10^{-7} x^6 - 4.36233 \times 10^{-8} x^8 - 4.84012 \times 10^{-8} x^{10} - 8.80251 \times 10^{-9} x^{12} - \\ 7.05181 \times 10^{-10} x^{14} - 2.66767 \times 10^{-11} x^{16} - 3.88462 \times 10^{-13} x^{18}) + e^{0.406784x^2} (9.59416+x^2) \\ \left. \left. \left. (2.56381 \times 10^{-11} - 4.34987 \times 10^{-10} x^2 + 6.97893 \times 10^{-10} x^4 + 8.14752 \times 10^{-11} x^6 - 2.05382 \times 10^{-10} x^8 - \right. \right. \right. \\ 3.61856 \times 10^{-11} x^{10} + 8.80849 \times 10^{-12} x^{12} + 3.38257 \times 10^{-12} x^{14} + 4.49412 \times 10^{-13} x^{16} + \\ \left. \left. \left. 3.15691 \times 10^{-14} x^{18} + 1.24965 \times 10^{-15} x^{20} + 2.63755 \times 10^{-17} x^{22} + 2.31215 \times 10^{-19} x^{24}) \right) \right\} \right\}$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=6.

P4 := P[x, 6]

Simplify[P4]

$$\left\{ \left\{ e^{-0.697847x^2} (7.29239+x^2) \left(0.240053 e^{0.197847x^2} (30.7762+x^2) + \right. \right. \right. \\ e^{0.386662x^2} (11.7401+x^2) (6.15196 \times 10^{-7} - 4.17722 \times 10^{-7} x^2 - 8.60422 \times 10^{-7} x^4 - 1.07213 \times 10^{-7} x^6) + \\ e^{0.397154x^2} (10.7316+x^2) (1.40834 \times 10^{-19} - 7.29385 \times 10^{-19} x^2 - 1.93406 \times 10^{-19} x^4 + \\ 2.55048 \times 10^{-19} x^6 + 7.99117 \times 10^{-20} x^8 + 7.61571 \times 10^{-21} x^{10} + 2.3181 \times 10^{-22} x^{12}) + \\ e^{0.402942x^2} (10.0824+x^2) (1.34255 \times 10^{-34} - 1.43601 \times 10^{-33} x^2 + 8.99493 \times 10^{-34} x^4 + \\ 8.02636 \times 10^{-34} x^6 - 8.19263 \times 10^{-35} x^8 - 9.08994 \times 10^{-35} x^{10} - 1.65315 \times 10^{-35} x^{12} - \\ 1.32436 \times 10^{-36} x^{14} - 5.00999 \times 10^{-38} x^{16} - 7.29547 \times 10^{-40} x^{18}) + e^{0.406784x^2} (9.59416+x^2) \\ \left. \left. \left. (1.87391 \times 10^{-51} - 3.17935 \times 10^{-50} x^2 + 5.10095 \times 10^{-50} x^4 + 5.95508 \times 10^{-51} x^6 - 1.50115 \times 10^{-50} x^8 - \right. \right. \right. \\ 2.64483 \times 10^{-51} x^{10} + 6.43819 \times 10^{-52} x^{12} + 2.47235 \times 10^{-52} x^{14} + 3.28478 \times 10^{-53} x^{16} + \\ \left. \left. \left. 2.3074 \times 10^{-54} x^{18} + 9.1338 \times 10^{-56} x^{20} + 1.9278 \times 10^{-57} x^{22} + 1.68997 \times 10^{-59} x^{24}) \right) \right\} \right\}$$

Gráfico para a probabilidade de transição para quatro valores de t .

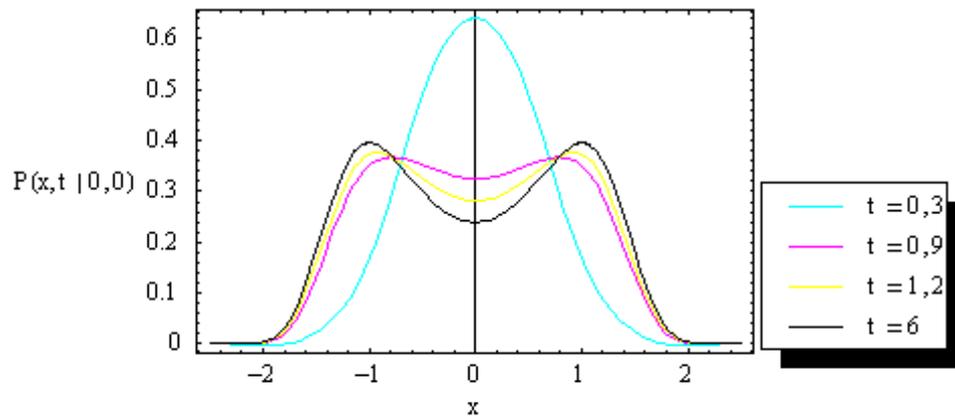


Figura II.10: Gráfico para a probabilidade de transição para quatro valores de t .

Os resultados encontrados neste apêndice, como a Figura II.10, estão mostrados no Capítulo IV.

APÊNDICE III

APÊNDICE III

Neste apêndice estão demonstrados os cálculos referentes ao potencial biestável assimétrico estudado no Capítulo V. São calculadas as funções de onda no estado fundamental para cada Hamiltoniano e as funções de onda normalizadas para o primeiro Hamiltoniano. Mostram-se os cálculos necessários para a probabilidade de transição para quatro valores diferentes de t e a representação gráfica referente a este cálculo.

Parâmetros utilizados para o estado fundamental de energia:

$$a_1 := -1$$

$$b_1 := 1.2$$

$$c_1 := 1$$

Superpotencial dado em (5.7):

$$w_1[x_] = a_1 x + b_1 x^2 + c_1 x^3$$

$$-x + 1.2 x^2 + x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o primeiro Hamiltoniano dada em (5.9):

$$\Psi_{01}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_1[x] dx\right]$$

$$e^{0.5x^2 - 0.4x^3 - 0.25x^4}$$

Constante de normalização.

$$N_0 = \sqrt{\frac{1}{15.299049153493689}}$$

$$0.255663$$

Função de onda normalizada no estado fundamental.

$$\Psi_0(x) = N_0 \Psi_0(x)$$

$$0.255663 e^{0.5x^2 - 0.4x^3 - 0.25x^4}$$

Gráfico para a função de onda $\Psi_0(x)$.

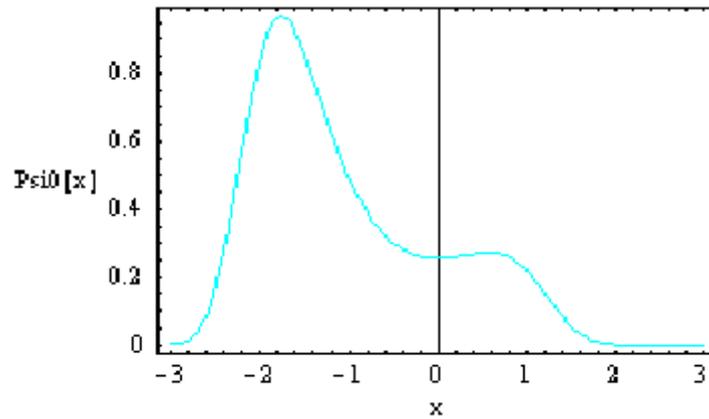


Figura III.1: Gráfico para a função de onda no estado fundamental.

A seguir estão os parâmetros variacionais, os superpotenciais e as funções de onda no estado fundamental até o sétimo Hamiltoniano.

$$a_2 := 2.0235660651442515'$$

$$b_2 := 0.38365940108367297'$$

$$c_2 := 0.13677548855625635'$$

$$k_2 := 0.4993947012465674'$$

$$w_2[x_] = a_2 x + b_2 x^2 + c_2 x^3 + k_2$$

$$0.499395 + 2.02357 x + 0.383659 x^2 + 0.136775 x^3$$

$$\Psi_{02}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_2[x] dx\right]$$

$$e^{-0.499395x - 1.01178x^2 - 0.127886x^3 - 0.0341939x^4}$$

$$a_3 := 2.176239828631597'$$

$$b_3 := 0.34051747778288444'$$

$$c_3 := 0.1266955990408857'$$

$$k_3 := 0.796042588354409'$$

$$w_3[x_] = a_3 x + b_3 x^2 + c_3 x^3 + k_3$$

$$0.796043 + 2.17624 x + 0.340517 x^2 + 0.126696 x^3$$

$$\Psi_{03}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_3[x] dx\right]$$

$$e^{-0.796043x - 1.08812x^2 - 0.113506x^3 - 0.0316739x^4}$$

$$a_4 := 2.322560761960149'$$

$$b_4 := 0.3148528620655588'$$

$$c_4 := 0.12154568010841245'$$

$$k_4 := 1.0263745387387242'$$

$$w_4[x_] = a_4 x + b_4 x^2 + c_4 x^3 + k_4$$

$$1.02637 + 2.32256 x + 0.314853 x^2 + 0.121546 x^3$$

$$\Psi_{04}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_4[x] dx\right]$$

$$e^{-1.02637x - 1.16126x^2 - 0.104951x^3 - 0.0303864x^4}$$

$$a_5 := 2.469902845442941'$$

$$b_5 := 0.35390350868408055'$$

$$c_5 := 0.15115346177487055'$$

$$k_5 := 1.2076524454681714'$$

$$w_5[x_] = a_5 x + b_5 x^2 + c_5 x^3 + k_5$$

$$1.20765 + 2.4699 x + 0.353904 x^2 + 0.151153 x^3$$

$$\Psi_{05}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_5[x] dx\right]$$

$$e^{-1.20765x - 1.23495x^2 - 0.117966x^3 - 0.0377864x^4}$$

$$a_6 := 2.6694328933420515'$$

$$b_6 := 0.49827610644535564'$$

$$c_6 := 0.24091511887227463'$$

$$k_6 := 1.3734631839249802'$$

$$w_6[x_] = a_6 x + b_6 x^2 + c_6 x^3 + k_6$$

$$1.37346 + 2.66943 x + 0.498276 x^2 + 0.240915 x^3$$

$$\Psi_{06}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_6[x] dx\right]$$

$$e^{-1.37346x - 1.33472x^2 - 0.166092x^3 - 0.0602268x^4}$$

$$a_7 := 2.9521139478829594'$$

$$b_7 := 0.6002737787475283'$$

$$c_7 := 0.30352930022381036'$$

$$k_7 := 1.5754572283625927'$$

$$w_7[x_] = a_7 x + b_7 x^2 + c_7 x^3 + k_7$$

$$1.57546 + 2.95211 x + 0.600274 x^2 + 0.303529 x^3$$

$$\Psi_{07}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_7[x] dx\right]$$

$$e^{-1.57546x - 1.47606x^2 - 0.200091x^3 - 0.0758823x^4}$$

Cálculos para a obtenção da função de onda no primeiro estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{11}[x] = -D[\Psi_{02}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{02}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_1 = \sqrt{\frac{1}{1.0570682368596227}}$$

0.972632

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{11}[x] = N_1 \Psi_{11}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi1[x].

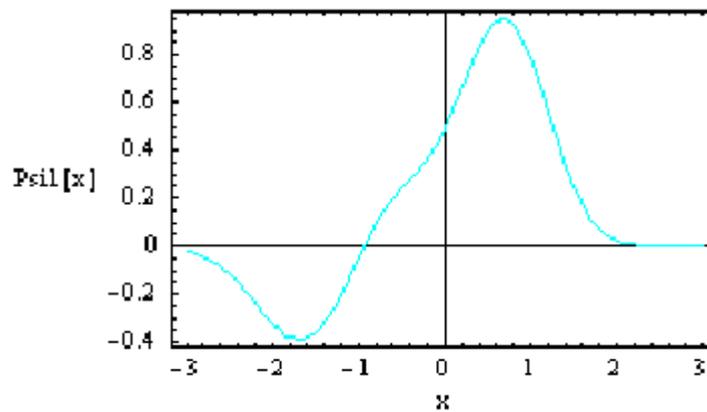


Figura III.2: Gráfico para a função de onda no primeiro estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no segundo estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{12}[x] = -D[\Psi_{03}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{03}[x]$$

$$\Psi_{21}[x] = -D[\Psi_{12}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{12}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_2 = \sqrt{\frac{1}{29.260019845533247}}$$

0.184868

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{i2}[x] = N_2 \Psi_{21}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi2[x].

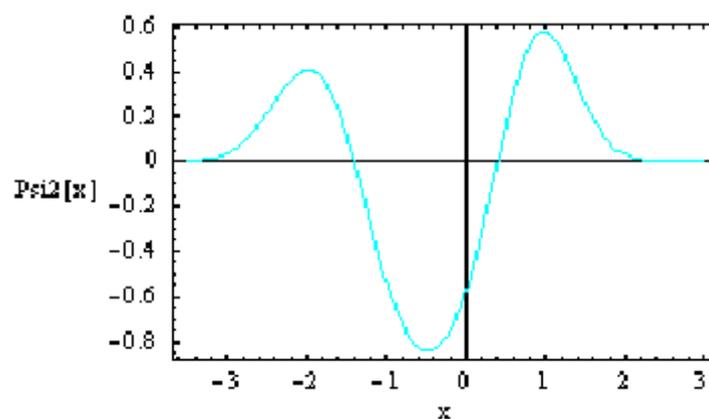


Figura III.3: Gráfico para a função de onda no segundo estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no terceiro estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{13}[x] = -D[\Psi_{04}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{04}[x]$$

$$\Psi_{22}[x] = -D[\Psi_{13}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{13}[x]$$

$$\Psi_{31}[x] = -D[\Psi_{22}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{22}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_3 = \sqrt{\frac{1}{535.645852036369}}$$

0.0432077

Função de onda normalizada.

$$\Psi_3[x] = N_3 \Psi_{31}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi3[x].

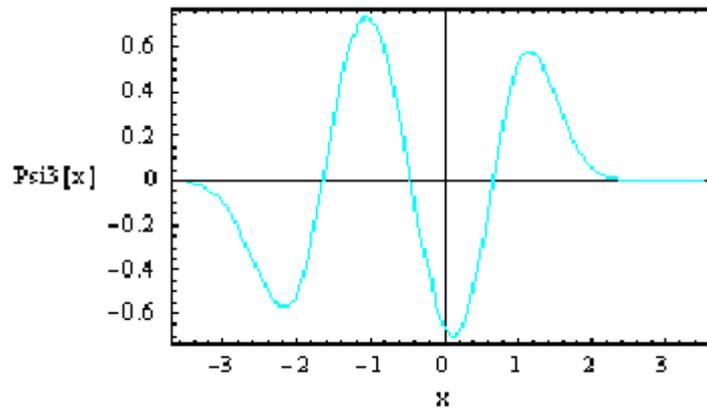


Figura III.4: Gráfico para a função de onda no terceiro estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no quarto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{14}[x] = -D[\Psi_{05}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{05}[x]$$

$$\Psi_{23}[x] = -D[\Psi_{14}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{14}[x]$$

$$\Psi_{32}[x] = -D[\Psi_{23}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{23}[x]$$

$$\Psi_{41}[x] = -D[\Psi_{32}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{32}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_4 = \sqrt{\frac{1}{13931.119621081349}}$$

0.00847241

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{41}[x] = N_4 \Psi_{41}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi4[x].

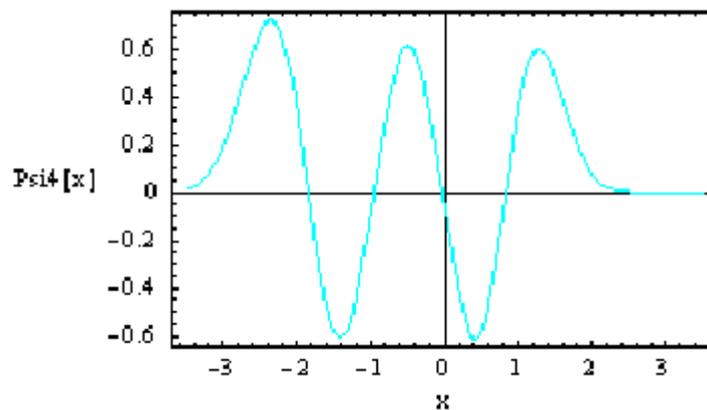


Figura III.5: Gráfico para a função de onda no quarto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no quinto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{15}[x] = -D[\Psi_{06}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{06}[x]$$

$$\Psi_{24}[x] = -D[\Psi_{15}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{15}[x]$$

$$\Psi_{33}[x] = -D[\Psi_{24}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{24}[x]$$

$$\Psi_{42}[x] = -D[\Psi_{33}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{33}[x]$$

$$\Psi_{51}[x] = -D[\Psi_{42}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{42}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_5 = \sqrt{\frac{1}{473917.4522004786}}$$

0.00145261

Função de onda normalizada.

$$\Psi_5[x] = N_5 \Psi_{51}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi5[x].

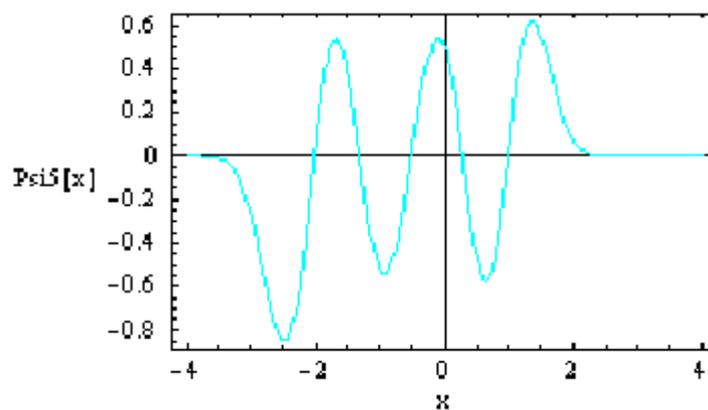


Figura III.6: Gráfico para a função de onda no quinto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no sexto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{16}[x] = -D[\Psi_{07}[x], \{x, 1\}] + w_6[x] \Psi_{07}[x]$$

$$\Psi_{25}[x] = -D[\Psi_{16}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{16}[x]$$

$$\Psi_{34}[x] = -D[\Psi_{25}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{25}[x]$$

$$\Psi_{43}[x] = -D[\Psi_{34}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{34}[x]$$

$$\Psi_{52}[x] = -D[\Psi_{43}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{43}[x]$$

$$\Psi_{61}[x] = -D[\Psi_{52}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{52}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_6 = \sqrt{\frac{1}{2.033443002696712 \cdot 10^7}}$$

0.00022176

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{i6}[x] = N_6 \Psi_{61}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi6[x].

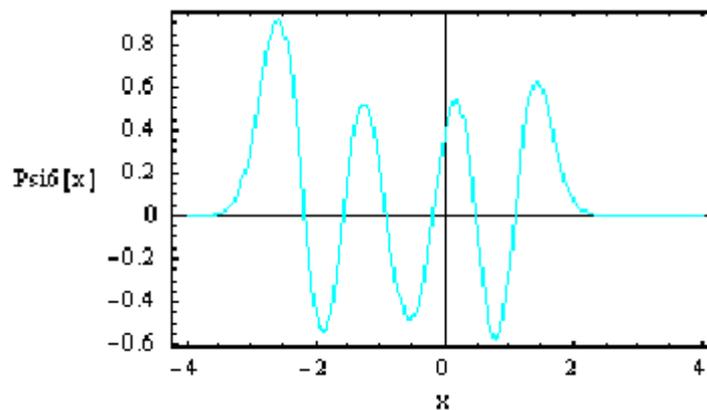


Figura III.7: Gráfico para a função de onda no sexto estado excitado.

Autovalores obtidos pelo formalismo supersimétrico aliado ao método variacional apresentados na Tabela 5.1:

$$\lambda_0 := 0$$

$$\lambda_1 := 0.3610074247196607`$$

$$\lambda_2 := 2.268222524585153`$$

$$\lambda_3 := 4.306378130415738`$$

$$\lambda_4 := 6.48469084653448`$$

$$\lambda_5 := 8.797666731834735`$$

$$\lambda_6 := 11.27187781187163`$$

Potencial dado em (5.1):

$$U[x_] = -0.5 x^2 + 0.4 x^3 + 0.25 x^4$$

$$-0.5 x^2 + 0.4 x^3 + 0.25 x^4$$

Coefficiente de difusão:

$$R := 0.5$$

Expressão dada em (5.17):

$$\Phi[x_] = \frac{U[x]}{R}$$

$$2. (-0.5 x^2 + 0.4 x^3 + 0.25 x^4)$$

Expressão utilizada para o cálculo da probabilidade de transição dada em (3.13).

$$F[x, t] := \text{Exp}\left[\frac{\Phi[0]}{2} - \frac{\Phi[x]}{2}\right] \{ \{ \text{Psi0}[x] \text{Psi0}[0] \text{Exp}[-\lambda_0 t] \} + \{ \text{Psi1}[x] \text{Psi1}[0] \text{Exp}[-\lambda_1 t] \} + \{ \text{Psi2}[x] \text{Psi2}[0] \text{Exp}[-\lambda_2 t] \} + \{ \text{Psi3}[x] \text{Psi3}[0] \text{Exp}[-\lambda_3 t] \} + \{ \text{Psi4}[x] \text{Psi4}[0] \text{Exp}[-\lambda_4 t] \} + \{ \text{Psi5}[x] \text{Psi5}[0] \text{Exp}[-\lambda_5 t] \} + \{ \text{Psi6}[x] \text{Psi6}[0] \text{Exp}[-\lambda_6 t] \} \}$$

Simplify[F[x, t]]

$$\left\{ \left\{ e^{-33.4898t - 0.770154x(1.005+x)} \left(0.0653635 e^{33.4898t + 0.270154x(0.830175+x)} (28.8859 + 2.24398xx^2) + 0.537051 e^{33.1288t + 0.48596x(0.966954+x)} (12.7239 + 1.30197xx^2) (0.932725 + x) (0.470994 + 0.46039x + x^2) - 8.82514 \times 10^{-6} e^{27.0052t + 0.482365x(0.883528+x)} (12.3673 + 1.42287xx^2) (-0.835392 + x) (0.0196721 + x) (0.968242 + x) (1.84272 + x) (1.74347 + 0.767816x + x^2) (20.516 + 1.95289x + x^2) (16.002 + 2.02308x + x^2) (11.6151 + 2.12409x + x^2) - 0.0020459 e^{29.1835t + 0.489767x(0.904405+x)} (12.3085 + 1.39371xx^2) (-0.655563 + x) (0.45887 + x) (1.64793 + x) (1.55893 + 0.733599x + x^2) (19.4701 + 2.18983x + x^2) (14.0806 + 2.32011x + x^2) - 0.0321462 e^{31.2216t + 0.48848x(0.931191+x)} (12.4923 + 1.35547xx^2) (-0.398576 + x) (1.4081 + x) (1.24863 + 0.701691x + x^2) (15.2317 + 2.40468x + x^2) + e^{24.6922t + 0.459925x(0.865921+x)} (12.8181 + 1.44837xx^2) (0.244848 - 0.0901249x - 2.10333x^2 - 2.63971x^3 - 1.31689x^4 + 0.746952x^5 + 2.06135x^6 + 1.83149x^7 + 1.10502x^8 + 0.49432x^9 + 0.168687x^{10} + 0.0470148x^{11} + 0.00972794x^{12} + 0.00170345x^{13} + 0.000183069x^{14} + 0.0000175989x^{15}) + e^{22.218t + 0.444271x(0.848797+x)} (13.0018 + 1.47051xx^2) (0.139856 + 0.867299x + 0.111614x^2 - 2.51904x^3 - 3.97261x^4 - 3.17337x^5 - 0.597683x^6 + 1.47941x^7 + 2.00657x^8 + 1.5598x^9 + 0.867455x^{10} + 0.379281x^{11} + 0.133831x^{12} + 0.0382714x^{13} + 0.00907689x^{14} + 0.00168227x^{15} + 0.000258247x^{16} + 0.0000260129x^{17} + 2.15488 \times 10^{-6}x^{18}) \right\} \right\}$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=0,32.

$$G1 := F[x, 0.32]$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=0,8.

$$G2 := F[x, 0.8]$$

Cálculo para a probabilidade de transição para $t=2$.

$$G3 := P[x, 2]$$

Cálculo para a probabilidade de transição para $t=15$.

$$G4 := P[x, 15]$$

Gráfico para a probabilidade de transição para quatro valores de t .

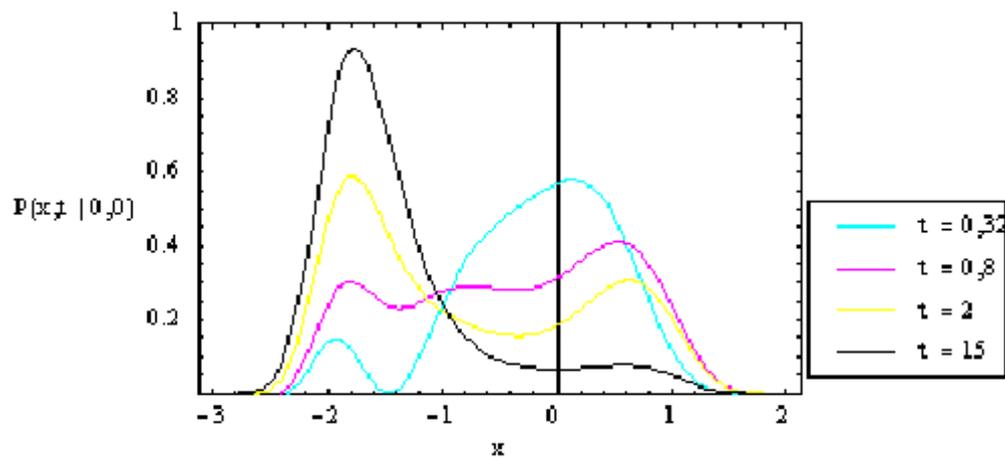


Figura III.8: Gráfico para a probabilidade de transição para quatro valores de t .

Os resultados encontrados neste apêndice, como a Figura III.8, estão mostrados no Capítulo V.

APÊNDICE IV

APÊNDICE IV

Neste apêndice é apresentada uma breve introdução de alguns conceitos sobre proteínas, como sua composição, conformação e atividade.

As proteínas são macromoléculas orgânicas constituídas de uma unidade funcional que são os aminoácidos. Na natureza existem dezenas de aminoácidos, dos quais vinte espécies fundamentais compõem todas as proteínas existentes.

Os aminoácidos são compostos formados por dois grupos orgânicos (amina e ácido carboxílico), um carbono assimétrico e um grupo lateral, normalmente conhecido como grupo R, que diferencia os aminoácidos entre si, conforme mostrado na Figura IV.1.

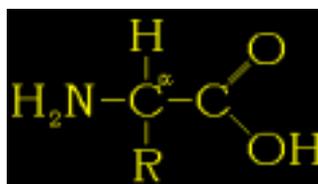


Figura IV.1: A estrutura acima representa o esquema geral para os aminoácidos. O $-\text{NH}_2$ representa o grupo amina, o $-\text{COOH}$ o ácido carboxílico, o R é a nomenclatura para radical e o carbono α que recebe esta designação por possuir quatro ligantes diferentes (carbono assimétrico).

Os aminoácidos são classificados de acordo com a característica que a cadeia lateral possui. Praticamente os aminoácidos de interesse biológico são agregados em três classes diferentes (Voet *et. al.*, 2000), organizados principalmente pela característica de polaridade do grupo R, conforme apresentado na Tabela IV.1.

Classificação	Aminoácido
Cadeias Laterais Apolares	Leucina (Leu, L)
	Prolina (Pro, P)
	Alanina (Ala, A)
	Valina (Val, V)
	Glicina (Gly, G)
	Isoleucina (Ile, I)
	Metionina (Met, M)
	Fenilalanina (Phe, F)
	Triptofano (Trp, W)
Cadeias Laterais Neutras	Serina (Ser, S)
	Treonina (Thr, T)
	Asparagina (Asn, N)
	Glutamina (Gln, Q)
	Tirosina (Tyr, Y)
	Cisteína (Cys, C)
Cadeias Laterais Carregadas	Lisina (Lys, K) (+)
	Arginina (Arg, R) (+)
	Histidina (His, H) (+)
	Ácido Aspártico (Asp, D) (-)
	Ácido Glutâmico (Glu, E) (-)

Tabela IV.1: Classificação dos aminoácidos quanto à cadeia lateral. Esta classificação leva em consideração a forma predominante dos aminoácidos em pH 7,0 (Voet *et al.*, 2000).

Os aminoácidos possuem a capacidade de promover ligações entre si. Esta ligação é chamada de ligação peptídica, realizada entre o grupo ácido de um aminoácido com o grupo amina de outro aminoácido. A união dos aminoácidos forma estruturas maiores e mais complexas que são as proteínas.

Nos mamíferos encontram-se proteínas funcionais de tamanhos variados, alguns peptídios ativos possuem poucos aminoácidos (8 - 10 resíduos) outras proteínas possuem milhares de aminoácidos.

A atividade protéica no organismo está intimamente relacionada a sua composição e conformação. Pode-se classificar as proteínas de acordo com estas características em quatro diferentes estruturas protéicas, designadas por estruturas: primária, secundária, terciária e quaternária.

A estrutura primária refere-se a seqüência dos aminoácidos em uma proteína, determinando a posição que cada aminoácido ocupa na cadeia protéica. Esta estrutura pode ser facilmente compreendida fazendo uma analogia a um colar de pérolas, onde cada pérola corresponderia a um aminoácido e o cordão que as une é a ligação peptídica.

A estrutura secundária é definida basicamente pela diferença de angulação assumida em cada ligação peptídica em relação aos carbonos alfas. Existem duas conformações de grande importância biológica que são α -hélice (Figura IV.2) e folha- β (Figura IV.3).



Figura IV.2: * Ilustração de uma α -hélice característica.

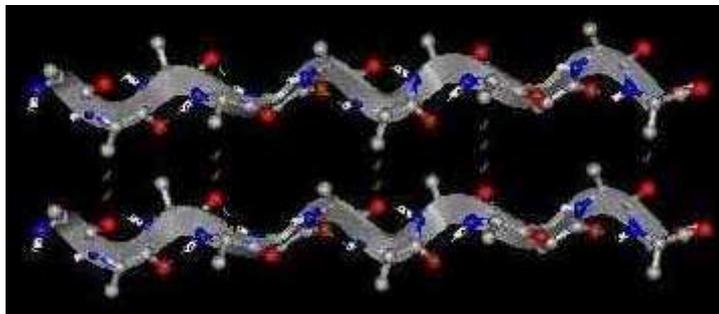


Figura IV.3: Ilustração de uma folha- β característica.

A estrutura terciária é conhecida também por estrutura globular devido a sobreposição das estruturas secundárias. As principais proteínas orgânicas, que mantêm os organismos vivos, dependem da manutenção fisiológica desta conformação.

A estrutura terciária mantém a sua conformação basicamente por interações hidrofílicas, interações hidrofóbicas, forças de van der Waals e pontes de sulfeto. Agentes externos, tais como temperatura, pH e força iônica, podem interferir na estabilidade desta estrutura rompendo-a ou alterando sutilmente a configuração original da proteína.

A Figura IV.4 representa a estrutura terciária da lipase. Pode-se observar a sobreposição das estruturas secundárias (α -hélice em vermelho, folha- β em amarelo e estruturas aleatórias pelas linhas verdes).

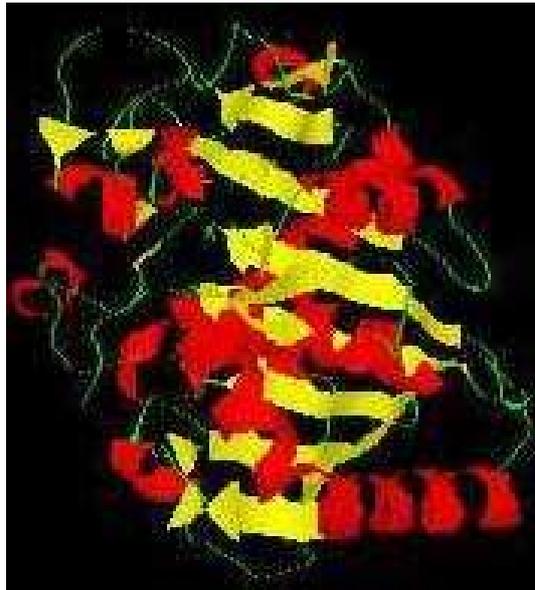


Figura IV.4: Ilustração da estrutura terciária da lipase.

Finalmente, a estrutura quaternária é caracterizada pela sobreposição de estruturas globulares distintas. Esta estrutura está associada a proteínas que possuem atividade biológica quando formada por duas ou mais cadeias protéicas. Alguns exemplos são imunoglobulinas (proteínas de defesa do organismo) e hemoglobina (proteína de transporte), entre outras.

As proteínas dotadas de atividade especial, que atuam em processos catalíticos, ou seja, aumentando a velocidade de reações bioquímicas, são chamadas de proteínas enzimáticas ou enzimas.

As enzimas são proteínas que possuem um sítio catalítico, que é uma região protéica com afinidade estereoquímica (bom encaixe entre substrato e sítio) a um determinado composto, que é chamado de substrato.

A Figura IV.5 mostra o sítio catalítico (em vermelho) e o substrato ligado ao sítio (em verde) da lisozima, que é uma enzima capaz de quebrar ou catalisar a parede celular bacteriana na região de açúcar que esta possui.

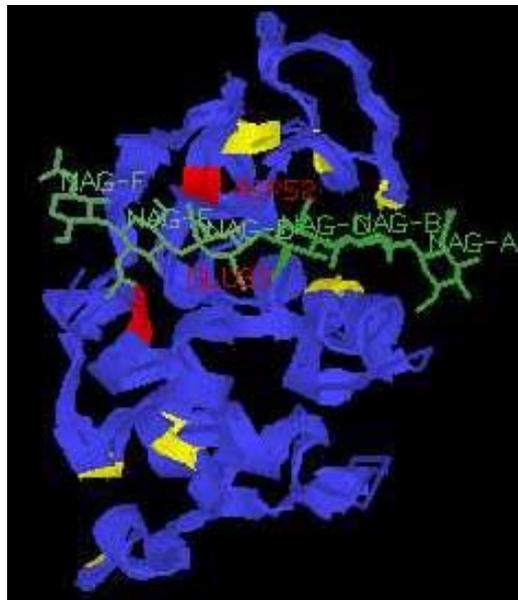


Figura IV.5: Ilustração do encaixe induzido enzima-substrato, entre a lisozima e o ácido N-acetilmurâmico e N-acetilglicosamina.

APÊNDICE V

APÊNDICE V

No item V.1 estão os cálculos referentes ao Capítulo VI. Novamente, são calculadas as funções de onda no estado fundamental para cada Hamiltoniano e as funções de onda normalizadas nos estados excitados para o primeiro Hamiltoniano. Mostram-se os cálculos necessários para a probabilidade de transição para quatro valores diferentes de t e a representação gráfica referente a este cálculo. Estão também os resultados para os cálculos da probabilidade total para os estados enovelado e desenovelado e o gráfico referente a estes cálculos.

Mostram-se no item V.2 os resultados obtidos para os autovalores de energia, probabilidade de transição e probabilidade total para vários valores do coeficiente de difusão.

V.1- Procedimento Utilizado para o Cálculo da Probabilidade de Transição e Probabilidade Total para $D = 0,5$

Parâmetros utilizados para o estado fundamental de energia:

$$a_1 := -1$$

$$b_1 := -1.2$$

$$c_1 := 1$$

Superpotencial dado em (6.8):

$$w_1[x] = a_1 x + b_1 x^2 + c_1 x^3$$

$$-x - 1.2 x^2 + x^3$$

Função de onda no estado fundamental para o primeiro Hamiltoniano dada em (6.10):

$$\Psi_{01}[x] = \text{Exp}\left[-\int w_1[x] dx\right]$$

$$e^{0.5x^2 + 0.4x^3 - 0.25x^4}$$

Constante de normalização.

$$N0 = \sqrt{\frac{1}{15.299049153493689}}$$

0.255663

Função de onda normalizada no estado fundamental.

$$\text{Psi0}[x_] = N0 \Psi01[x]$$

$$0.255663 e^{0.5x^2+0.4x^3-0.25x^4}$$

Gráfico para a função de onda Psi0[x].

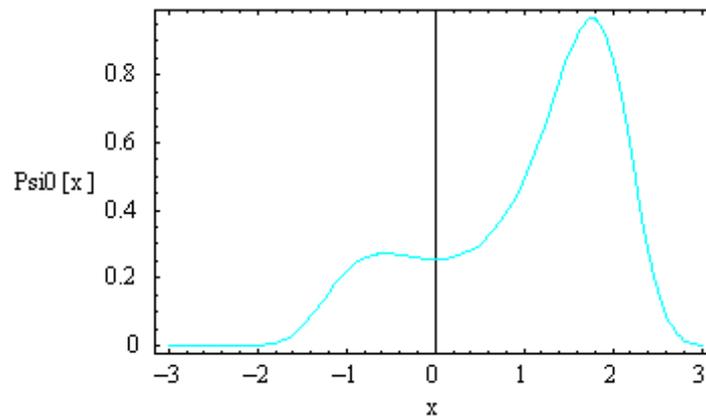


Figura V.1: Gráfico para a função de onda no estado fundamental.

A seguir estão os parâmetros variacionais, os superpotenciais e as funções de onda no estado fundamental até o sétimo Hamiltoniano.

$$a_2 := 2.023798044258745'$$

$$b_2 := -0.38389634361402364'$$

$$c_2 := 0.13680138267599312'$$

$$k_2 := -0.49946482878627324'$$

$$w_2[x_] = a_2 x + b_2 x^2 + c_2 x^3 + k_2$$

$$-0.499465 + 2.0238 x - 0.383896 x^2 + 0.136801 x^3$$

$$\Psi_{02}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_2[x] dx\right]$$

$$e^{0.499465x - 1.0119x^2 + 0.127965x^3 - 0.0342003x^4}$$

$$a_3 := 2.180536562454669'$$

$$b_3 := -0.32629767553367905'$$

$$c_3 := 0.117163468173898'$$

$$k_3 := -0.8013412970356816'$$

$$w_3[x_] = a_3 x + b_3 x^2 + c_3 x^3 + k_3$$

$$-0.801341 + 2.18054 x - 0.326298 x^2 + 0.117163 x^3$$

$$\Psi_{03}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_3[x] dx\right]$$

$$e^{0.801341x - 1.09027x^2 + 0.108766x^3 - 0.0292909x^4}$$

$$a_4 := 2.3152215691031808'$$

$$b_4 := -0.299433788533097'$$

$$c_4 := 0.11054409651333728'$$

$$k_4 := -1.0255813351015317'$$

$$w_4[x_] = a_4 x + b_4 x^2 + c_4 x^3 + k_4$$

$$-1.02558 + 2.31522 x - 0.299434 x^2 + 0.110544 x^3$$

$$\Psi_{04}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_4[x] dx\right]$$

$$e^{1.02558x - 1.15761x^2 + 0.0998113x^3 - 0.027636x^4}$$

$$a_5 := 2.4408677491990036'$$

$$b_5 := -0.2789742679630128'$$

$$c_5 := 0.10493800095007044'$$

$$k_5 := -1.2105377274849813'$$

$$w_5[x_] = a_5 x + b_5 x^2 + c_5 x^3 + k_5$$

$$-1.21054 + 2.44087 x - 0.278974 x^2 + 0.104938 x^3$$

$$\Psi_{05}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_5[x] dx\right]$$

$$e^{1.21054x - 1.22043x^2 + 0.0929914x^3 - 0.0262345x^4}$$

$$a_6 := 2.5569261543665904$$

$$b_6 := -0.26229555181165326$$

$$c_6 := 0.10009136692735764$$

$$k_6 := -1.3679368611544602$$

$$w_6[x_] = a_6 x + b_6 x^2 + c_6 x^3 + k_6$$

$$-1.36794 + 2.55693 x - 0.262296 x^2 + 0.100091 x^3$$

$$\Psi_{06}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_6[x] dx\right]$$

$$e^{1.36794x - 1.27846x^2 + 0.0874319x^3 - 0.0250228x^4}$$

$$a_7 := 2.6170759405495625$$

$$b_7 := -0.15092270498953997$$

$$c_7 := 0.05405974046669225$$

$$k_7 := -1.5039032467691318$$

$$w_7[x_] = a_7 x + b_7 x^2 + c_7 x^3 + k_7$$

$$-1.5039 + 2.61708 x - 0.150923 x^2 + 0.0540597 x^3$$

$$\Psi_{07}[x_] = \text{Exp}\left[-\int w_7[x] dx\right]$$

$$e^{1.5039x - 1.30854x^2 + 0.0503076x^3 - 0.0135149x^4}$$

Cálculos para a obtenção da função de onda no primeiro estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{11}[x] = -D[\Psi_{02}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{02}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_1 = \sqrt{\frac{1}{1.0570672213853394}}$$

0.972632

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{11}[x] = N_1 \Psi_{11}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi1[x].

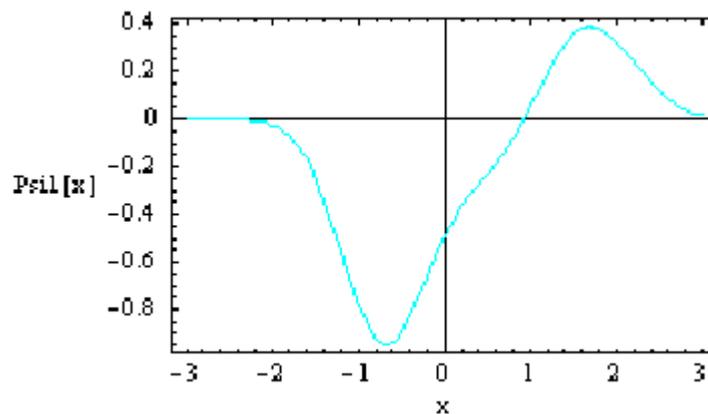


Figura V.2: Gráfico para a função de onda no primeiro estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no segundo estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{12}[x] = -D[\Psi_{03}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{03}[x]$$

$$\Psi_{21}[x] = -D[\Psi_{12}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{12}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_2 = \sqrt{\frac{1}{29.311377668890614}}$$

0.184706

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{i2}[x] = N_2 \Psi_{21}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi2[x].

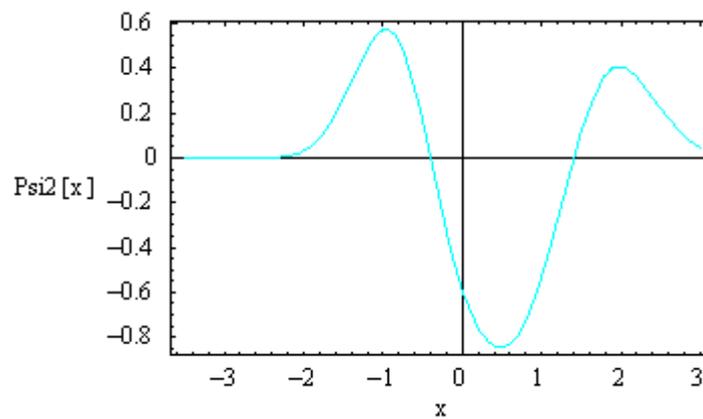


Figura V.3: Gráfico para a função de onda no segundo estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no terceiro estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{13}[x] = -D[\Psi_{04}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{04}[x]$$

$$\Psi_{22}[x] = -D[\Psi_{13}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{13}[x]$$

$$\Psi_{31}[x] = -D[\Psi_{22}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{22}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_3 = \sqrt{\frac{1}{538.5741352101163}}$$

0.0430901

Função de onda normalizada.

$$\Psi_3[x] = N_3 \Psi_{31}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi3[x].

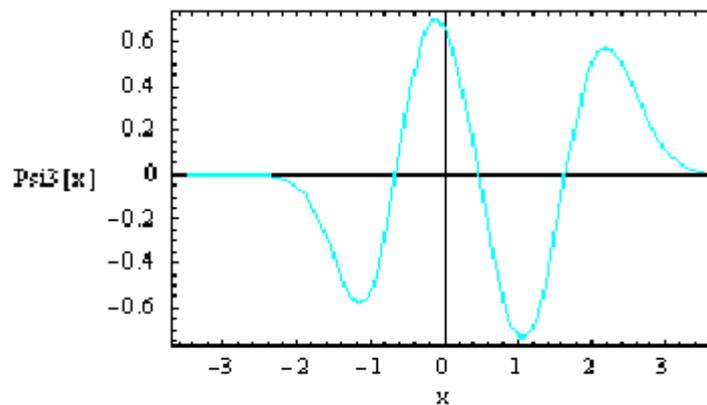


Figura V.4: Gráfico para a função de onda no terceiro estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no quarto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{14}[x] = -D[\Psi_{05}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{05}[x]$$

$$\Psi_{23}[x] = -D[\Psi_{14}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{14}[x]$$

$$\Psi_{32}[x] = -D[\Psi_{23}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{23}[x]$$

$$\Psi_{41}[x] = -D[\Psi_{32}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{32}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_4 = \sqrt{\frac{1}{14175.136765068704}}$$

0.00839917

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{41}[x] = N_4 \Psi_{41}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi4[x].

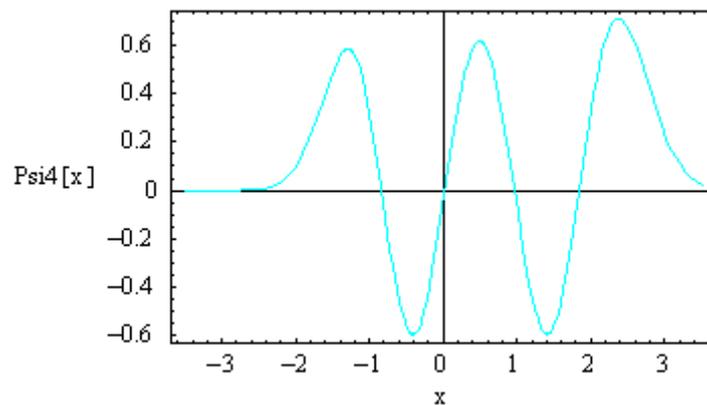


Figura V.5: Gráfico para a função de onda no quarto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no quinto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{15}[x] = -D[\Psi_{06}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{06}[x]$$

$$\Psi_{24}[x] = -D[\Psi_{15}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{15}[x]$$

$$\Psi_{33}[x] = -D[\Psi_{24}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{24}[x]$$

$$\Psi_{42}[x] = -D[\Psi_{33}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{33}[x]$$

$$\Psi_{51}[x] = -D[\Psi_{42}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{42}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_5 = \sqrt{\frac{1}{500442.2838904702}}$$

0.00141359

Função de onda normalizada.

$$\Psi_5[x] = N_5 \Psi_{51}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi5[x].

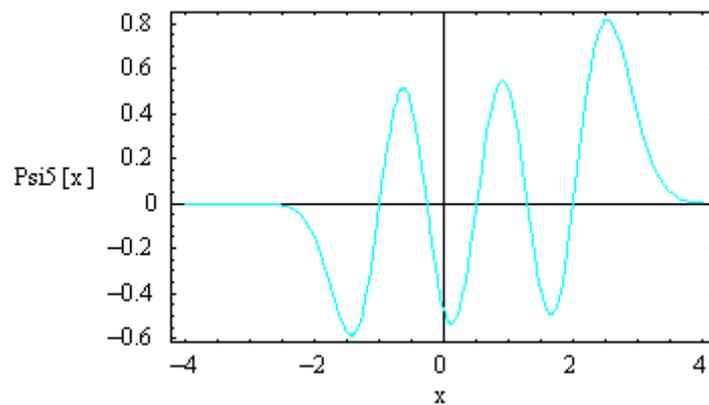


Figura V.6: Gráfico para a função de onda no quinto estado excitado.

Cálculos para a obtenção da função de onda no sexto estado excitado para o primeiro Hamiltoniano.

$$\Psi_{16}[x] = -D[\Psi_{07}[x], \{x, 1\}] + w_6[x] \Psi_{07}[x]$$

$$\Psi_{25}[x] = -D[\Psi_{16}[x], \{x, 1\}] + w_5[x] \Psi_{16}[x]$$

$$\Psi_{34}[x] = -D[\Psi_{25}[x], \{x, 1\}] + w_4[x] \Psi_{25}[x]$$

$$\Psi_{43}[x] = -D[\Psi_{34}[x], \{x, 1\}] + w_3[x] \Psi_{34}[x]$$

$$\Psi_{52}[x] = -D[\Psi_{43}[x], \{x, 1\}] + w_2[x] \Psi_{43}[x]$$

$$\Psi_{61}[x] = -D[\Psi_{52}[x], \{x, 1\}] + w_1[x] \Psi_{52}[x]$$

Constante de normalização.

$$N_6 = \sqrt{\frac{1}{2.2466540215256445 \cdot 10^7}}$$

0.000210975

Função de onda normalizada.

$$\Psi_{i6}[x] = N_6 \Psi_{61}[x]$$

Gráfico para a função de onda Psi6[x].

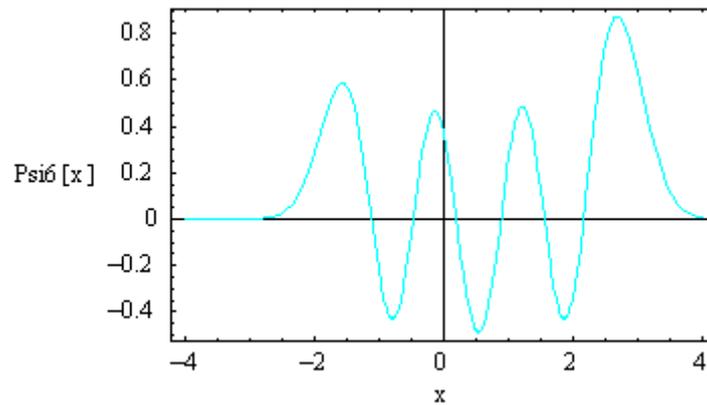


Figura V.7: Gráfico para a função de onda no sexto estado excitado.

Autovalores obtidos pelo formalismo supersimétrico aliado ao método variacional apresentados na Tabela 6.1:

$$\lambda_0 := 0$$

$$\lambda_1 := 0.3610074323532305'$$

$$\lambda_2 := 2.2682808541328425'$$

$$\lambda_3 := 4.31090676595687'$$

$$\lambda_4 := 6.481894946065607'$$

$$\lambda_5 := 8.777845277698479'$$

$$\lambda_6 := 11.191936455349845'$$

Potencial dado em (6.1):

$$U[x_] = -0.5 x^2 - 0.4 x^3 + 0.25 x^4$$

$$-0.5 x^2 - 0.4 x^3 + 0.25 x^4$$

Coefficiente de difusão:

$$R := 0.5$$

Expressão dada em (3.7):

$$\Phi[x_] = \frac{U[x]}{R}$$

$$2. (-0.5 x^2 - 0.4 x^3 + 0.25 x^4)$$

Expressão utilizada para o cálculo da probabilidade de transição dada em (6.18).

$$\begin{aligned}
 &F[x, t] := \\
 &\text{Exp}\left[\frac{\Phi[-0.6]}{2} - \frac{\Phi[x]}{2}\right] \\
 &((\text{Psi0}[x] \text{Psi0}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_0 t]) + (\text{Psi1}[x] \text{Psi1}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_1 t]) + \\
 &(\text{Psi2}[x] \text{Psi2}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_2 t]) + (\text{Psi3}[x] \text{Psi3}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_3 t]) + (\text{Psi4}[x] \text{Psi4}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_4 t]) + \\
 &(\text{Psi5}[x] \text{Psi5}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_5 t]) + (\text{Psi6}[x] \text{Psi6}[-0.6] \text{Exp}[-\lambda_6 t])) \\
 &\text{Simplify}[F[x, t]] \\
 &e^{-33.3919t - 7.06721x^2 - 0.6559x^4} \\
 &\left(0.0653635 e^{33.3919tx^2 + 8.06721x + 0.1559x^2} - 0.0000457972 e^{26.91t + 0.379665x + 0.193201tx} (16.5032 + 1.10529xx^2) \right. \\
 &\quad (-1.84165 + x) (-0.965415 + x) (-0.0256917 + x) (0.835206 + x) (14.6831 - 2.34841x + x^2) \\
 &\quad (19.6908 - 2.23762x + x^2) (24.8562 - 2.16032x + x^2) (1.83486 - 0.746161x + x^2) + \\
 &0.000281267 e^{29.081t + 0.378263x + 0.161798tx} (16.7572 + 1.15953xx^2) (-1.64801 + x) (-0.459338 + x) \\
 &\quad (0.655284 + x) (15.0394 - 2.40231x + x^2) (20.7706 - 2.2757x + x^2) (1.57708 - 0.730723x + x^2) + \\
 &0.0154606 e^{31.1236t + 0.376609x + 0.124833tx} (17.045 + 1.22608xx^2) (-1.40666 + x) \\
 &\quad (0.396484 + x) (15.826 - 2.45256x + x^2) (1.26263 - 0.699912x + x^2) - \\
 &0.973111 e^{33.0309t + 0.371699x + 0.0766399tx} (17.5331 + 1.34377xx^2) (-0.932763 + x) (0.471031 - 0.460529x + x^2) + \\
 &e^{24.614t + 0.380877x + 0.220644tx} (16.2776 + 1.05912xx^2) (-0.224691 - 0.20192x + 2.08363x^2 - 1.95329x^3 + \\
 &\quad 0.313759x^4 + 1.10106x^5 - 1.65594x^6 + 1.11747x^7 - 0.511229x^8 + 0.182567x^9 - 0.0477409x^{10} + \\
 &\quad 0.0107445x^{11} - 0.00170418x^{12} + 0.000245284x^{13} - 0.0000200592x^{14} + 1.66149 \times 10^{-6}x^{15}) + \\
 &e^{22.1999t + 0.392385x + 0.243656tx} (15.7301 + 0.903962xx^2) (-0.0926057 + 0.446376x + 0.326623x^2 - \\
 &\quad 1.6485x^3 + 1.32042x^4 - 0.308276x^5 - 0.522061x^6 + 0.760587x^7 - 0.485573x^8 + 0.21698x^9 - \\
 &\quad 0.0759225x^{10} + 0.020398x^{11} - 0.00473794x^{12} + 0.000844771x^{13} - 0.000136171x^{14} + \\
 &\quad 0.0000157661x^{15} - 1.72643 \times 10^{-6}x^{16} + 1.06967 \times 10^{-7}x^{17} - 7.13529 \times 10^{-9}x^{18}) \left. \right)
 \end{aligned}$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=1.

$$K1 := F[x, 1]$$

Cálculo para a probabilidade de transição para t=2.

$$K2 := F[x, 2]$$

Cálculo para a probabilidade de transição para $t=3$.

$$K3 := P[x, 3]$$

Cálculo para a probabilidade de transição para $t=10$.

$$K4 := P[x, 10]$$

Gráfico para a probabilidade de transição para quatro valores de t .

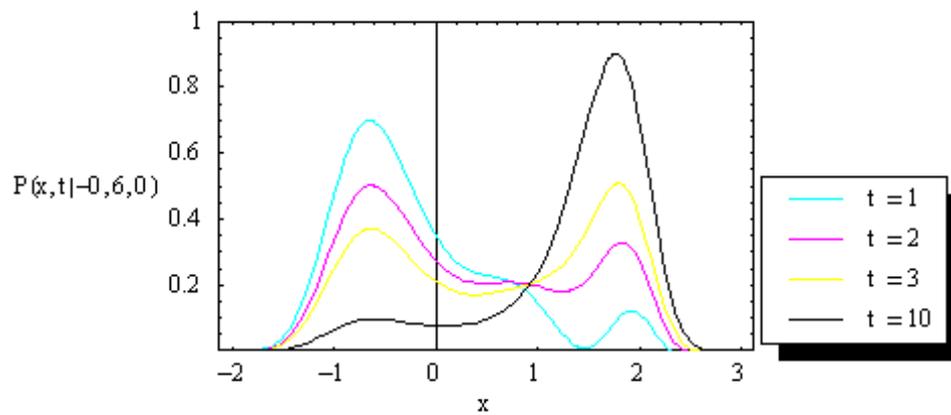


Figura V.8: Gráfico para a probabilidade de transição para quatro valores de t .

Através das expressões (6.19) e (6.20) fez-se os cálculos para as probabilidades totais para os estados enovelado (NE) e desenovelado (ND), com vários valores de t . Abaixo estão os valores encontrados através destes cálculos.

NE = {{(0, 0), (1, 0.3168477935779399`), (1.25, 0.37166636899318317`), (1.5, 0.42055148702255324`), (1.75, 0.46456827205257`), (2, 0.5044255960938825`), (2.25, 0.5406405175309094`), (2.5, 0.57361565188887`), (2.75, 0.6036802899254001`), (3, 0.631113687852894`), (3.25, 0.6561588153279154`), (3.5, 0.6790307836393508`), (3.75, 0.6999222389504758`), (4, 0.7190069917424231`), (4.25, 0.7364425997871217`), (4.5, 0.7523723133187739`), (4.75, 0.7669266173412762`), (5, 0.7802245076559807`), (6, 0.8228871871123017`), (7, 0.8526215099909779`), (8, 0.8733455082078095`), (9, 0.8877895875801456`), (10, 0.8978567322357484`), (12, 0.9097636104544828`), (13, 0.9131720508044896`), (15, 0.917203371091012`), (17, 0.9191616756385353`), (18, 0.9197222561803127`), (20, 0.9203852807541029`)}}

ND = {{(0, 1), (1, 0.683152203236521`), (1.25, 0.6283336278212777`), (1.5, 0.5794485097919081`), (1.75, 0.5354317247618927`), (2, 0.49557440072058173`), (2.25, 0.45935947928355647`), (2.5, 0.4263843449255973`), (2.75, 0.3963197068890687`), (3, 0.36888630896157604`), (3.25, 0.343841181486556`), (3.5, 0.32096921317512184`), (3.75, 0.300077757863998`), (4, 0.28099300507205155`), (4.25, 0.26355739702735387`), (4.5, 0.2476276834957024`), (4.75, 0.23307337947320078`), (5, 0.2197754891584971`), (6, 0.1771128097038891`), (7, 0.1473784868065923`), (8, 0.12665448859431877`), (9, 0.11221040922515942`), (10, 0.10214326457177081`), (12, 0.09023638636169223`), (13, 0.08682794600641379`), (15, 0.08279662572077878`), (17, 0.08083832117368615`), (18, 0.08027774063203237`), (20, 0.07961471605838787`)}}

Gráfico para a probabilidade total.

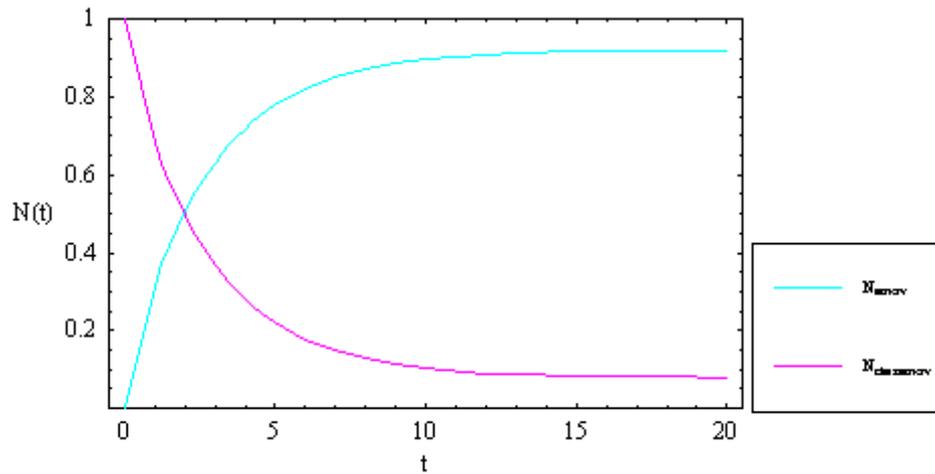


Figura V.9: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para os estados envelado e desenovelado.

Os resultados encontrados neste apêndice, como as Figuras V.8 e V.9, estão mostrados no Capítulo VI.

V.2- Resultados Obtidos para os Autovalores de Energia, Probabilidade de Transição e Probabilidade Total.

Parâmetros Variacionais				EV _n = λ _n
a₁ = -1	b₁ = -1,2	c₁ = 1	k₁ = 0	EV₀ = 0
a₂ = 2,90169	b₂ = -0,43033	c₂ = 0,01499	k₂ = -0,50172	EV₁ = 0,25290
a₃ = 2,87907	b₃ = -0,43881	c₃ = 0,01545	k₃ = -0,80819	EV₂ = 1,86415
a₄ = 2,84372	b₄ = -0,44361	c₄ = 0,01650	k₄ = -1,12750	EV₃ = 3,39556
a₅ = 2,84859	b₅ = -0,52404	c₅ = 0,04718	k₅ = -1,46315	EV₄ = 4,83254
a₆ = 2,87887	b₆ = -0,58612	c₆ = 0,07125	k₆ = -1,84491	EV₅ = 6,16293
a₇ = 2,96050	b₇ = -0,65459	c₇ = 0,09681	k₇ = -2,26201	EV₆ = 7,40148

Tabela V.1: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para D = 0,3.

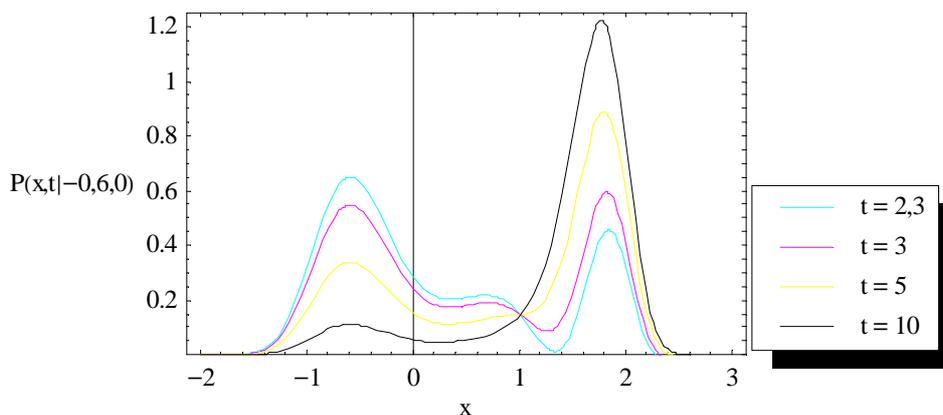


Figura V.10: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com D = 0,3 para t = 2,3, t = 3, t = 5 e t = 10.

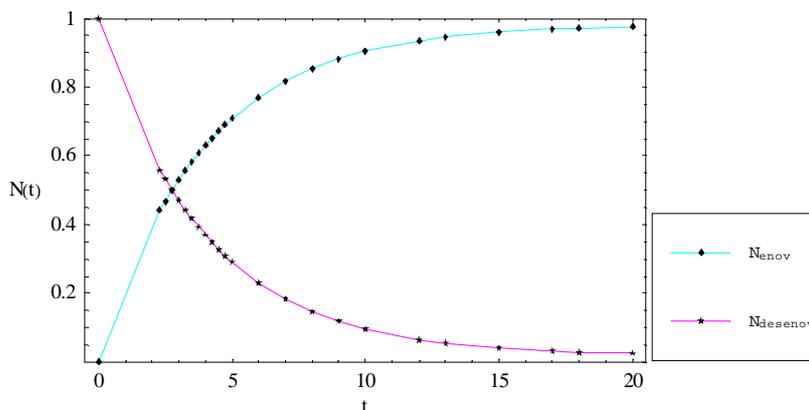


Figura V.11: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado (N_{desenov}) com D = 0,3.

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 2,35914$	$b_2 = -0,41576$	$c_2 = 0,09827$	$k_2 = -0,50787$	$EV_1 = 0,30642$
$a_3 = 2,43744$	$b_3 = -0,39037$	$c_3 = 0,09668$	$k_3 = -0,82269$	$EV_2 = 2,05719$
$a_4 = 2,52253$	$b_4 = -0,36790$	$c_4 = 0,09415$	$k_4 = -1,09618$	$EV_3 = 3,83079$
$a_5 = 2,60745$	$b_5 = -0,34410$	$c_5 = 0,08955$	$k_5 = -1,33521$	$EV_4 = 5,65098$
$a_6 = 2,68713$	$b_6 = -0,31866$	$c_6 = 0,08312$	$k_6 = -1,54386$	$EV_5 = 7,53034$
$a_7 = 2,69668$	$b_7 = -0,19034$	$c_7 = 0,03529$	$k_7 = -1,71943$	$EV_6 = 9,47311$

Tabela V.2: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,4$.

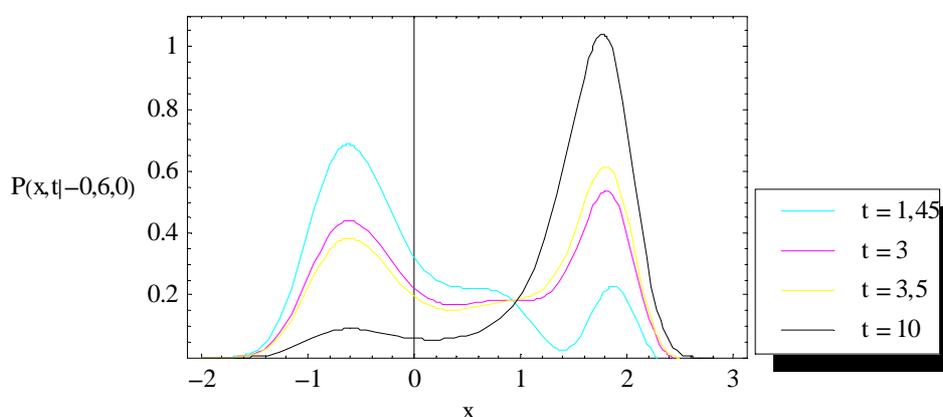


Figura V.12: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,4$ para $t = 1,45$, $t = 3$, $t = 3,5$ e $t = 10$.

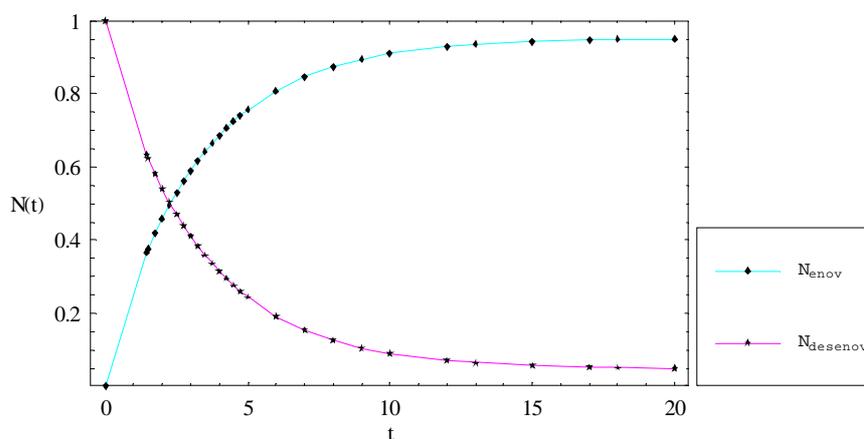


Figura V.13: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 0,4$.

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 1,79776$	$b_2 = -0,34290$	$c_2 = 0,14951$	$k_2 = -0,48869$	$EV_1 = 0,41666$
$a_3 = 2,00025$	$b_3 = -0,28717$	$c_3 = 0,12861$	$k_3 = -0,76243$	$EV_2 = 2,49019$
$a_4 = 2,16791$	$b_4 = -0,25960$	$c_4 = 0,11902$	$k_4 = -0,95592$	$EV_3 = 4,79094$
$a_5 = 2,31615$	$b_5 = -0,23956$	$c_5 = 0,11152$	$k_5 = -1,11048$	$EV_4 = 7,28940$
$a_6 = 2,44566$	$b_6 = -0,21400$	$c_6 = 0,10037$	$k_6 = -1,24061$	$EV_5 = 9,96592$
$a_7 = 2,55675$	$b_7 = -0,19259$	$c_7 = 0,09087$	$k_7 = -1,34809$	$EV_6 = 12,8034$

Tabela V.3: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,6$.

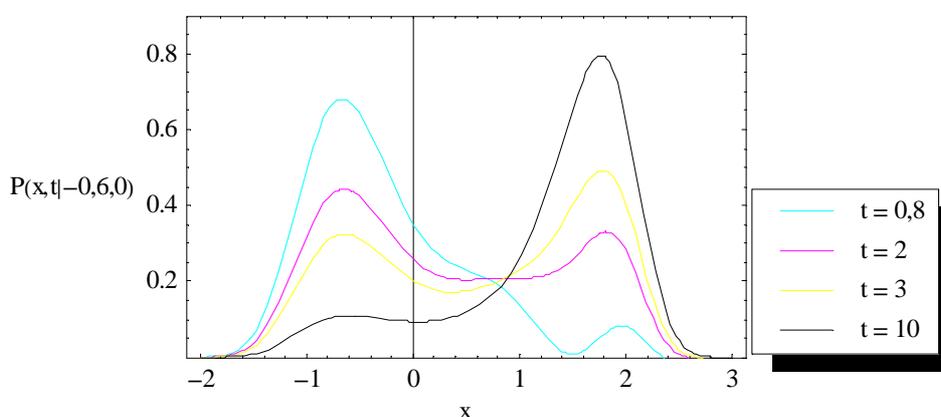


Figura V.14: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,6$ para $t = 0,8$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.

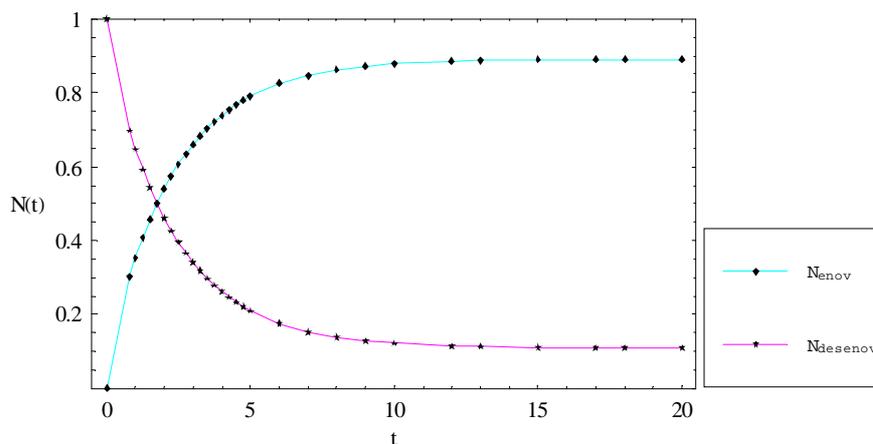


Figura V.15: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 0,6$.

Parâmetros Variacionais				EV $n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 1,50578$	$b_2 = -0,28584$	$c_2 = 0,14760$	$k_2 = -0,45672$	$EV_1 = 0,52836$
$a_3 = 1,74456$	$b_3 = -0,26337$	$c_3 = 0,14434$	$k_3 = -0,69006$	$EV_2 = 2,90867$
$a_4 = 1,96015$	$b_4 = -0,23240$	$c_4 = 0,12980$	$k_4 = -0,86660$	$EV_3 = 5,65139$
$a_5 = 2,13949$	$b_5 = -0,21173$	$c_5 = 0,11958$	$k_5 = -1,00136$	$EV_4 = 8,72915$
$a_6 = 2,29843$	$b_6 = -0,21159$	$c_6 = 0,12009$	$k_6 = -1,10869$	$EV_5 = 12,0893$
$a_7 = 2,45523$	$b_7 = -0,22354$	$c_7 = 0,12537$	$k_7 = -1,21044$	$EV_6 = 15,6955$

Tabela V.4: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 0,8$.

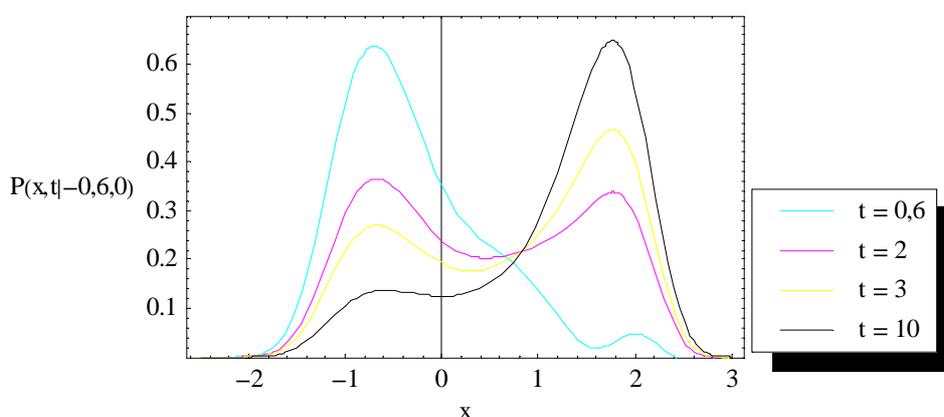


Figura V.16: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 0,8$ para $t = 0,6$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.

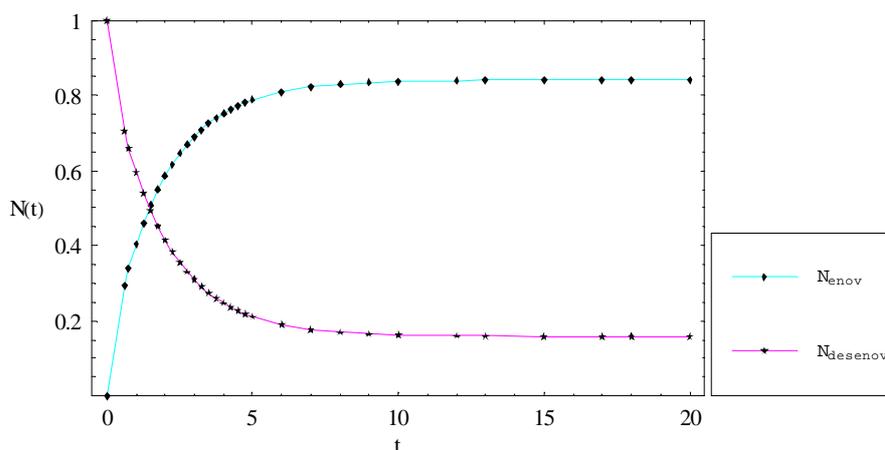


Figura V.17: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado enovelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 0,8$.

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 1,32338$	$b_2 = -0,23989$	$c_2 = 0,13608$	$k_2 = -0,42920$	$EV_1 = 0,63761$
$a_3 = 1,57531$	$b_3 = -0,20066$	$c_3 = 0,11754$	$k_3 = -0,63803$	$EV_2 = 3,31080$
$a_4 = 1,77163$	$b_4 = -0,17707$	$c_4 = 0,10560$	$k_4 = -0,78076$	$EV_3 = 6,45495$
$a_5 = 1,93263$	$b_5 = -0,16234$	$c_5 = 0,09817$	$k_5 = -0,89123$	$EV_4 = 9,97746$
$a_6 = 2,07315$	$b_6 = -0,14713$	$c_6 = 0,08976$	$k_6 = -0,98209$	$EV_5 = 13,8146$
$a_7 = 2,19430$	$b_7 = -0,13901$	$c_7 = 0,08596$	$k_7 = -1,05754$	$EV_6 = 17,9290$

Tabela V.5: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1$.

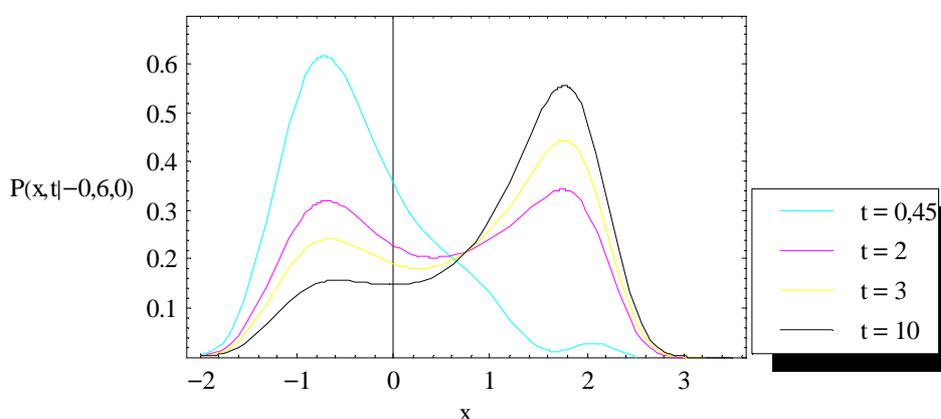


Figura V.18: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1$ para $t = 0,45$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.

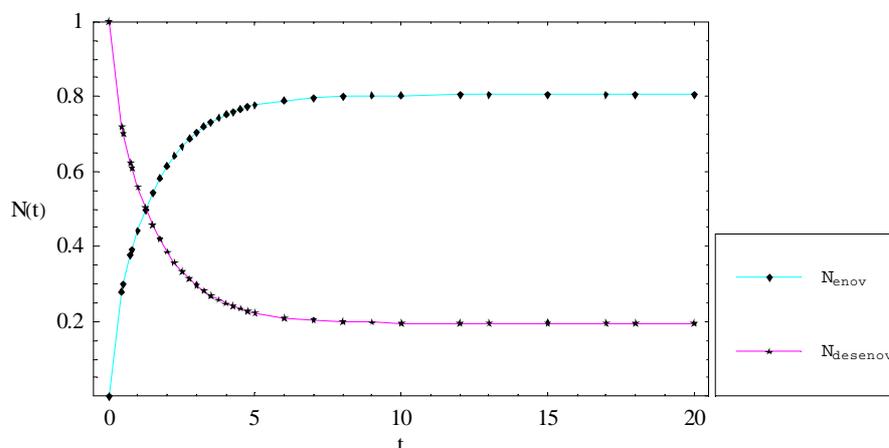


Figura V.19: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 1$.

Parâmetros Variacionais				EV $n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 1,19519$	$b_2 = -0,20702$	$c_2 = 0,12447$	$k_2 = -0,40439$	$EV_1 = 0,74288$
$a_3 = 1,44849$	$b_3 = -0,17191$	$c_3 = 0,10681$	$k_3 = -0,59317$	$EV_2 = 3,68802$
$a_4 = 1,64062$	$b_4 = -0,15163$	$c_4 = 0,09678$	$k_4 = -0,72052$	$EV_3 = 7,19671$
$a_5 = 1,79990$	$b_5 = -0,13820$	$c_5 = 0,08959$	$k_5 = -0,81692$	$EV_4 = 11,1487$
$a_6 = 1,93836$	$b_6 = -0,12831$	$c_6 = 0,08353$	$k_6 = -0,89608$	$EV_5 = 15,4716$
$a_7 = 2,06135$	$b_7 = -0,12030$	$c_7 = 0,07787$	$k_7 = -0,96425$	$EV_6 = 20,1175$

Tabela V.6: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 1,2$.

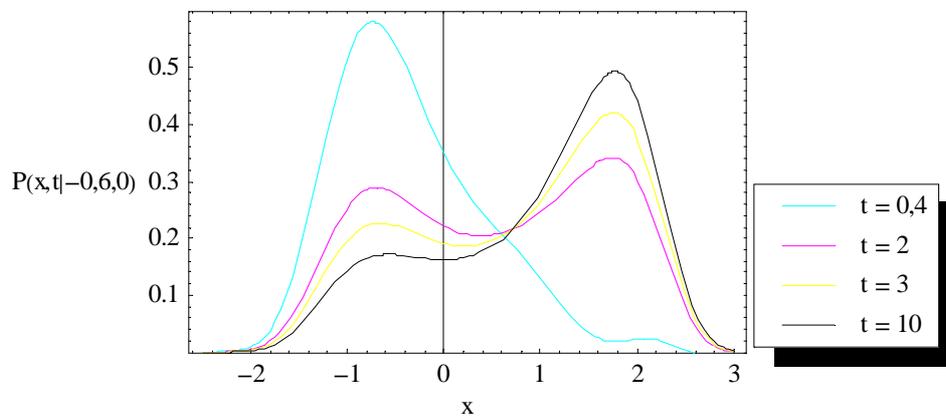


Figura V.20: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 1,2$ para $t = 0,4$, $t = 2$, $t = 3$ e $t = 10$.

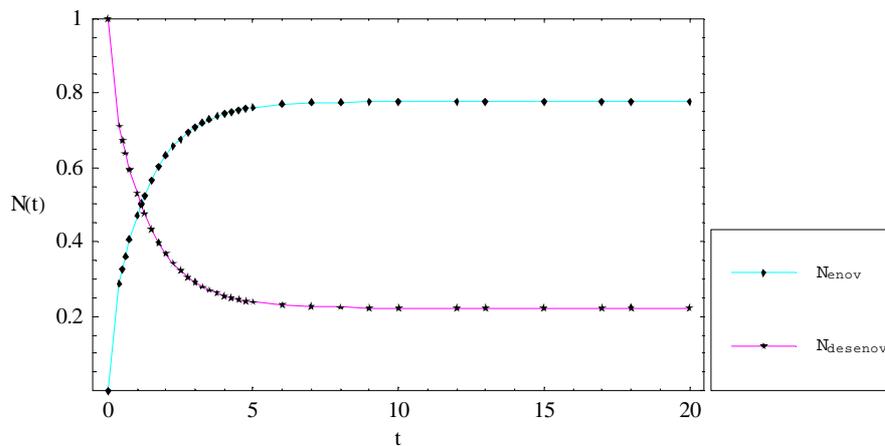


Figura V.21: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 1,2$.

Parâmetros Variacionais				EV _n = λ _n
a ₁ = -1	b ₁ = -1,2	c ₁ = 1	k ₁ = 0	EV ₀ = 0
a ₂ = 1,09906	b ₂ = -0,18154	c ₂ = 0,11363	k ₂ = -0,38305	EV ₁ = 0,84384
a ₃ = 1,34853	b ₃ = -0,15013	c ₃ = 0,09686	k ₃ = -0,55493	EV ₂ = 4,04362
a ₄ = 1,53710	b ₄ = -0,13290	c ₄ = 0,08657	k ₄ = -0,66991	EV ₃ = 7,88507
a ₅ = 1,69219	b ₅ = -0,12168	c ₅ = 0,07896	k ₅ = -0,75951	EV ₄ = 12,2246
a ₆ = 1,82223	b ₆ = -0,11235	c ₆ = 0,07335	k ₆ = -0,83442	EV ₅ = 16,9776
a ₇ = 1,93551	b ₇ = -0,10574	c ₇ = 0,06934	k ₇ = -0,89802	EV ₆ = 22,0841

Tabela V.7: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para D = 1,4.

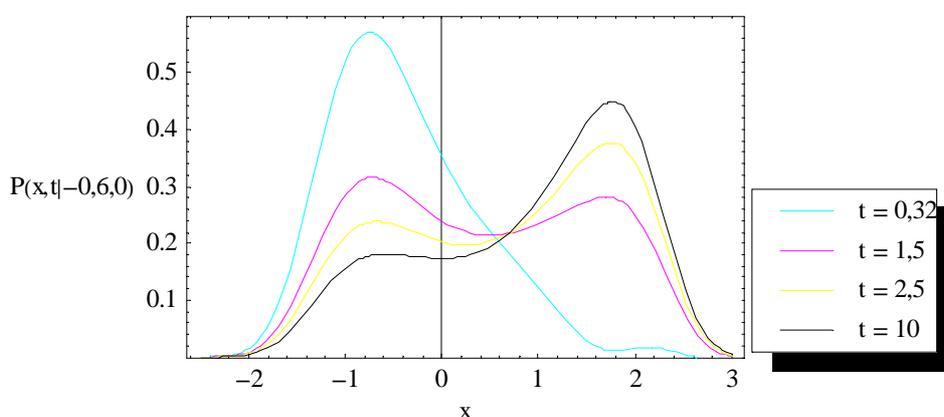


Figura V.22: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com D = 1,4 para t = 0,32, t = 1,5, t = 2,5 e t = 10.

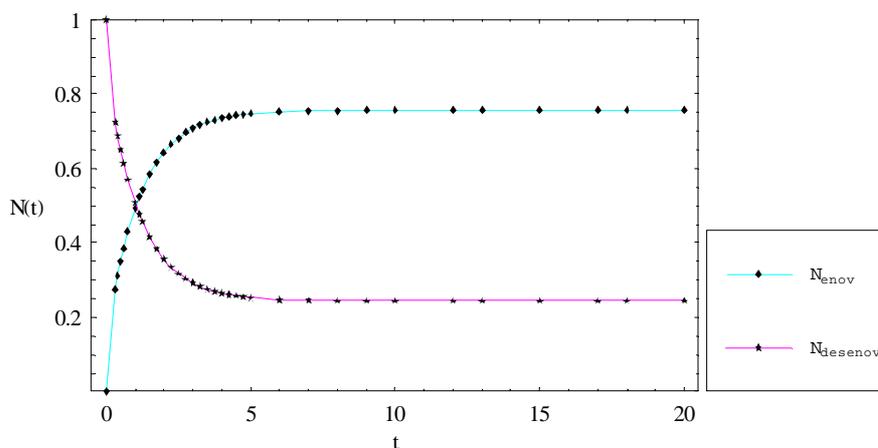


Figura V.23: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado (N_{desenov}) com D = 1,4.

Parâmetros Variacionais				EV _n = λ _n
a ₁ = -1	b ₁ = -1,2	c ₁ = 1	k ₁ = 0	EV ₀ = 0
a ₂ = 1,02355	b ₂ = -0,16161	c ₂ = 0,10420	k ₂ = -0,36455	EV ₁ = 0,94060
a ₃ = 1,26874	b ₃ = -0,13361	c ₃ = 0,08814	k ₃ = -0,52321	EV ₂ = 4,38042
a ₄ = 1,45069	b ₄ = -0,11818	c ₄ = 0,07870	k ₄ = -0,62998	EV ₃ = 8,53349
a ₅ = 1,59825	b ₅ = -0,10791	c ₅ = 0,07224	k ₅ = -0,71275	EV ₄ = 13,2334
a ₆ = 1,72289	b ₆ = -0,06815	c ₆ = 0,04957	k ₆ = -0,78838	EV ₅ = 18,3845
a ₇ = 1,80508	b ₇ = -0,05092	c ₇ = 0,03924	k ₇ = -0,82917	EV ₆ = 23,9319

Tabela V.8: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para D = 1,6.

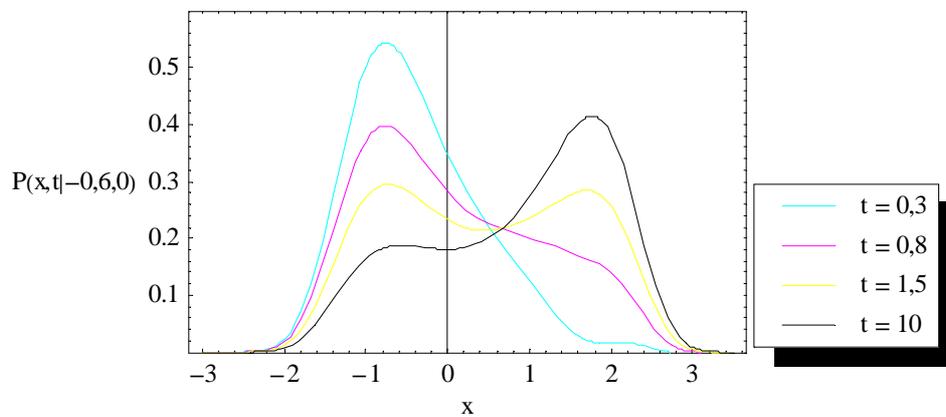


Figura V.24: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com D = 1,6 para t = 0,3, t = 0,8, t = 1,5 e t = 10.

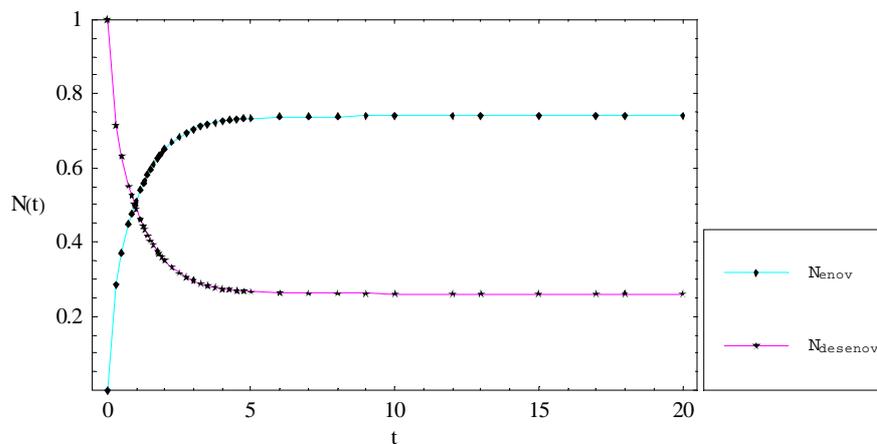


Figura V.25: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado (N_{desenov}) com D = 1,6.

Parâmetros Variacionais				EV _n = λ _n
a ₁ = -1	b ₁ = -1,2	c ₁ = 1	k ₁ = 0	EV ₀ = 0
a ₂ = 0,96227	b ₂ = -0,14594	c ₂ = 0,09606	k ₂ = -0,34830	EV ₁ = 1,03347
a ₃ = 1,20182	b ₃ = -0,12051	c ₃ = 0,08089	k ₃ = -0,49690	EV ₂ = 4,70008
a ₄ = 1,37879	b ₄ = -0,10656	c ₄ = 0,07165	k ₄ = -0,59691	EV ₃ = 9,14545
a ₅ = 1,51989	b ₅ = -0,09646	c ₅ = 0,06543	k ₅ = -0,67496	EV ₄ = 14,1841
a ₆ = 1,64475	b ₆ = -0,05396	c ₆ = 0,03759	k ₆ = -0,74897	EV ₅ = 19,7079
a ₇ = 1,70827	b ₇ = -0,05367	c ₇ = 0,03908	k ₇ = -0,78129	EV ₆ = 25,6567

Tabela V.9: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para D = 1,8.

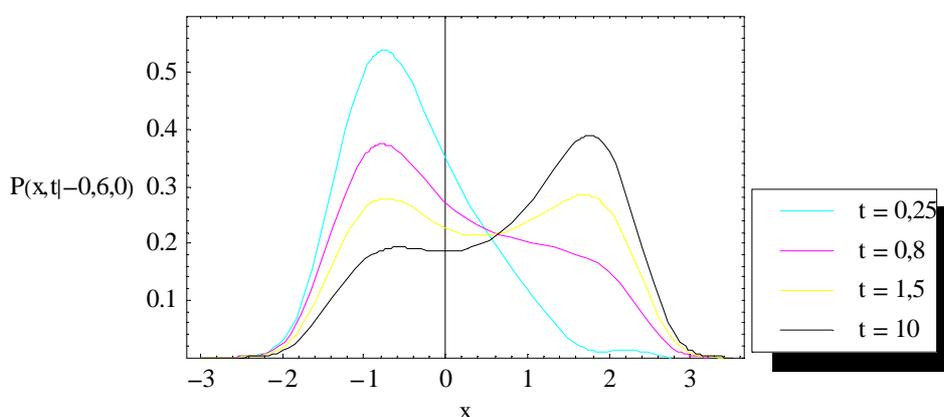


Figura V.26: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com D = 1,8 para t = 0,25, t = 0,8, t = 1,5 e t = 10.

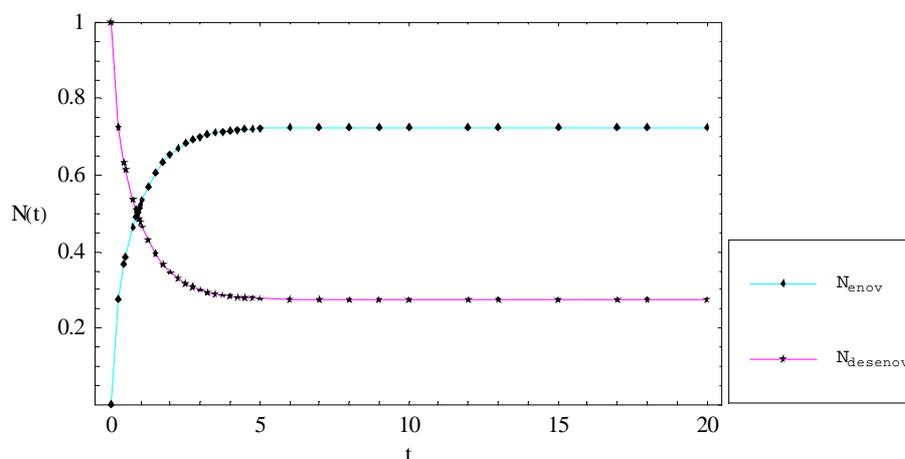


Figura V.27: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado (N_{desenov}) com D = 1,8.

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 0,91064$	$b_2 = -0,13240$	$c_2 = 0,08902$	$k_2 = -0,33404$	$EV_1 = 1,12275$
$a_3 = 1,14467$	$b_3 = -0,10932$	$c_3 = 0,07458$	$k_3 = -0,47318$	$EV_2 = 5,00552$
$a_4 = 1,32132$	$b_4 = -0,09172$	$c_4 = 0,06270$	$k_4 = -0,57435$	$EV_3 = 9,72784$
$a_5 = 1,45098$	$b_5 = -0,08417$	$c_5 = 0,05769$	$k_5 = -0,64368$	$EV_4 = 15,1028$
$a_6 = 1,56112$	$b_6 = -0,07879$	$c_6 = 0,05466$	$k_6 = -0,70162$	$EV_5 = 20,9713$
$a_7 = 1,66005$	$b_7 = -0,07385$	$c_7 = 0,05112$	$k_7 = -0,75189$	$EV_6 = 27,2668$

Tabela V.10: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 2$.

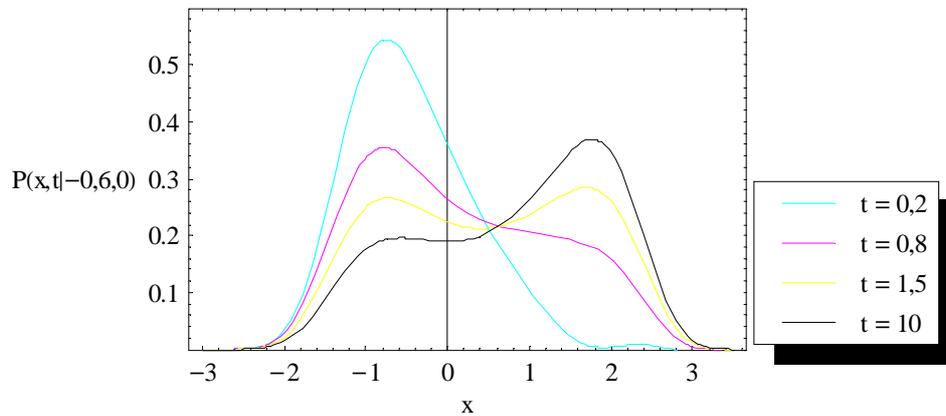


Figura V.28: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 2$ para $t = 0,2$, $t = 0,8$, $t = 1,5$ e $t = 10$

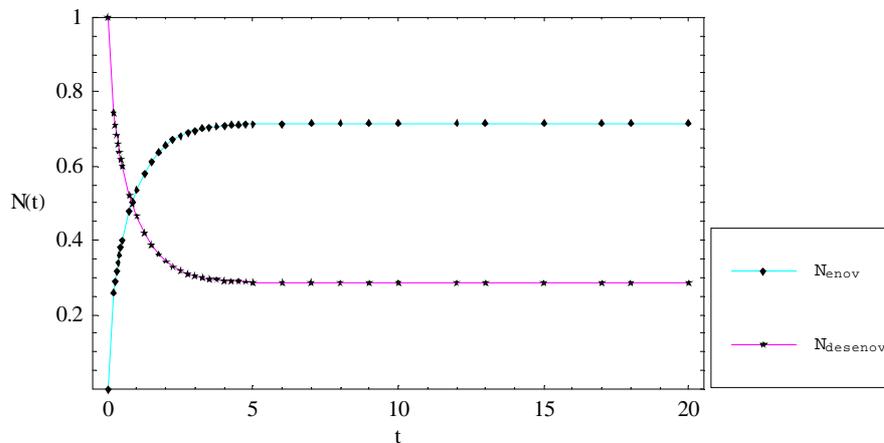


Figura V.29: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 2$.

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 0,57343$	$b_2 = -0,05660$	$c_2 = 0,04213$	$k_2 = -0,22389$	$EV_1 = 2,18573$
$a_3 = 0,74440$	$b_3 = -0,04627$	$c_3 = 0,03498$	$k_3 = -0,30738$	$EV_2 = 8,55480$
$a_4 = 0,86601$	$b_4 = -0,04087$	$c_4 = 0,03099$	$k_4 = -0,36373$	$EV_3 = 16,4179$
$a_5 = 0,96277$	$b_5 = -0,03739$	$c_5 = 0,02837$	$k_5 = -0,40780$	$EV_4 = 25,3915$
$a_6 = 1,04736$	$b_6 = -0,03547$	$c_6 = 0,02605$	$k_6 = -0,44651$	$EV_5 = 35,2695$
$a_7 = 1,12703$	$b_7 = -0,01781$	$c_7 = 0,01228$	$k_7 = -0,48610$	$EV_6 = 45,9379$

Tabela V.11: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 5$.

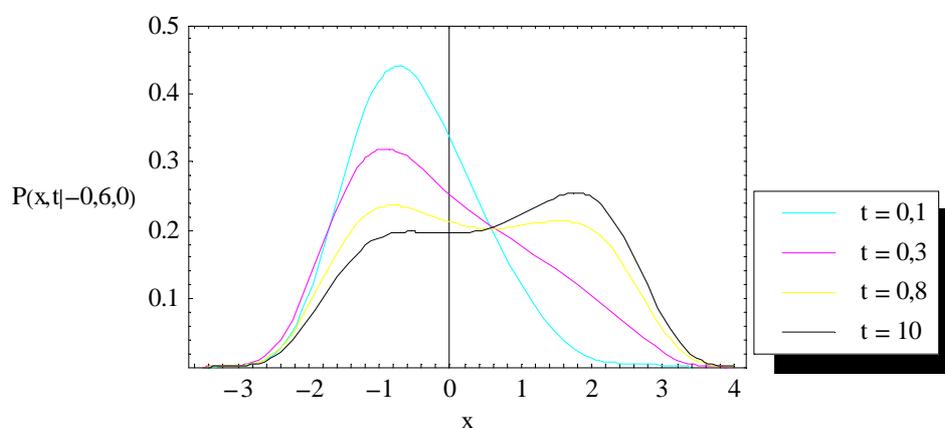


Figura V.30: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 5$ para $t = 0,1$, $t = 0,3$, $t = 0,8$ e $t = 10$.

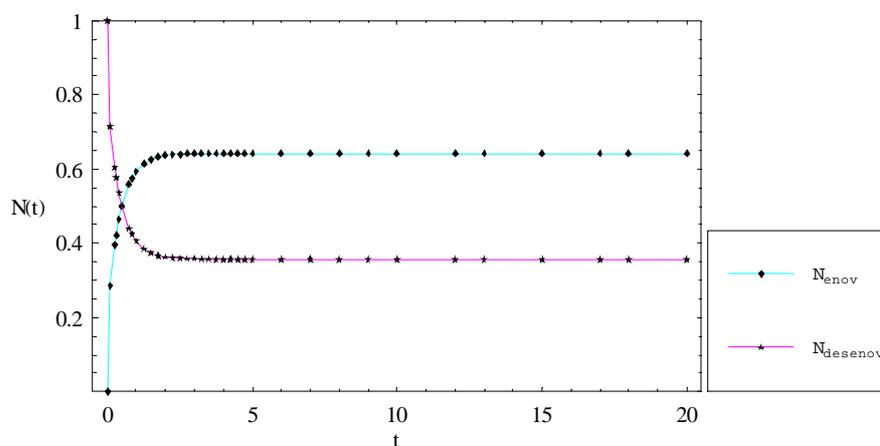


Figura V.31: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado envelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 5$.

Parâmetros Variacionais				$EV_n = \lambda_n$
$a_1 = -1$	$b_1 = -1,2$	$c_1 = 1$	$k_1 = 0$	$EV_0 = 0$
$a_2 = 0,40549$	$b_2 = -0,02901$	$c_2 = 0,02303$	$k_2 = -0,16250$	$EV_1 = 3,42689$
$a_3 = 0,53583$	$b_3 = -0,02390$	$c_3 = 0,01902$	$k_3 = -0,21880$	$EV_2 = 12,6300$
$a_4 = 0,62721$	$b_4 = -0,02113$	$c_4 = 0,01682$	$k_4 = -0,25781$	$EV_3 = 24,0756$
$a_5 = 0,69954$	$b_5 = -0,01930$	$c_5 = 0,01537$	$k_5 = -0,28854$	$EV_4 = 37,1755$
$a_6 = 0,76028$	$b_6 = -0,01794$	$c_6 = 0,01434$	$k_6 = -0,31428$	$EV_5 = 51,6186$
$a_7 = 0,81442$	$b_7 = -0,01666$	$c_7 = 0,01325$	$k_7 = -0,33614$	$EV_6 = 67,2092$

Tabela V.12: Autovalores obtidos através do formalismo supersimétrico e método variacional (EV_n) e os parâmetros minimizados para $D = 10$.

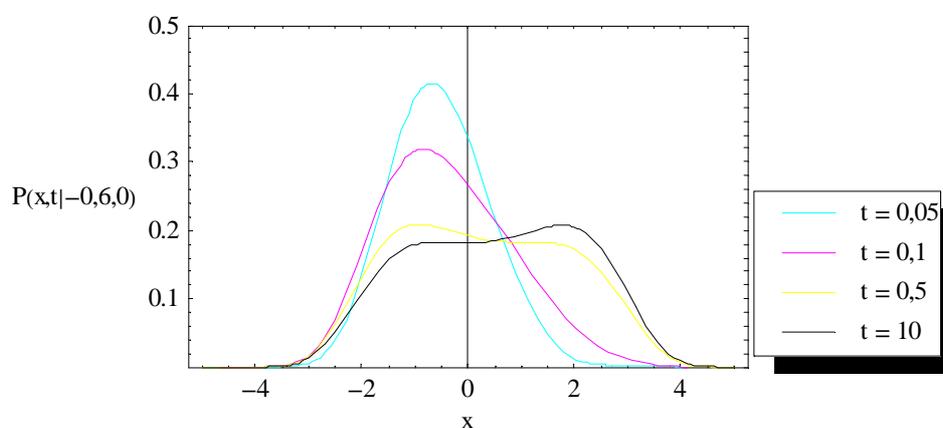


Figura V.32: Resultados obtidos no cálculo da probabilidade de transição com $D = 10$ para $t = 0,05$, $t = 0,1$, $t = 0,5$ e $t = 10$.

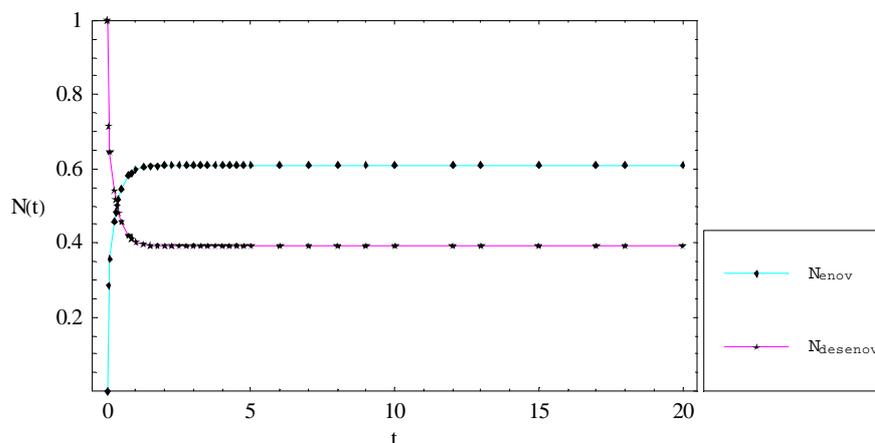


Figura V.33: Gráfico das probabilidades totais em função do tempo para o estado enovelado (N_{enov}) e para o estado desenovelado ($N_{desenov}$) com $D = 10$.