



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"  
Câmpus de São José do Rio Preto

Saiara Fabiana Menezes dos Santos

Equação de Fokker-Planck para Potenciais Polinomiais

São José do Rio Preto

2018

Saiara Fabiana Menezes dos Santos

## **Equação de Fokker-Planck para Potenciais Polinomiais**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestra em Biofísica Molecular, junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular, do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Câmpus de São José do Rio Preto.

Financiadora: CAPES

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

São José do Rio Preto

2018

Santos, Saiara Fabiana Menezes dos.

Equação de Fokker-Planck para potenciais polinomiais / Saiara Fabiana Menezes dos Santos . -- São José do Rio Preto, 2018  
57f. : il., grafs., tabs.

Orientador: Elso Drigo Filho

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, São José do Rio Preto

1. Biofísica. 2. Biologia molecular. 3. Fokker-Planck, Equação de. 4. Distribuição (Probabilidades). I. Título.

CDU – 577.3

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do IBILCE  
UNESP - Câmpus de São José do Rio Preto

Saiara Fabiana Menezes dos Santos

## **Equação de Fokker-Planck para Potenciais Polinomiais**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestra em Biofísica Molecular, junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular, do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Câmpus de São José do Rio Preto.

Financiadora: CAPES

Comissão Examinadora

**BANCA EXAMINADORA:**

Prof. Dr. Elso Drigo Filho  
UNESP – São José do Rio Preto

Profa. Dra. Regina Maria Ricotta  
Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza

Prof. Dr. Ícaro Putinhon Caruso  
UNESP – São José do Rio Preto

São José do Rio Preto

27 de abril de 2018

"O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001"

*“Ó profundidade das riquezas, tanto da sabedoria, como da ciência de Deus! Quão insondáveis são os seus juízos, e quão inescrutáveis os seus caminhos!*

*Por que quem compreendeu a mente do Senhor? ou quem foi seu conselheiro?*

*Ou quem lhe deu primeiro a Ele, para que lhe seja recompensado? Porque dEle e por Ele, e para Ele, são todas as coisas; glória, pois, a Ele eternamente. Amém.”*

*Bíblia Sagrada, Romanos 11:33-36*

## RESUMO

Tem-se como objetivo estudar a relação da equação de Fokker-Planck mapeada em uma equação tipo Schrödinger e assim usar supersimetria para resolução de alguns potenciais polinomiais encontrando sua distribuição de probabilidade  $P(x,t)$  e o tempo de passagem entre barreiras de potenciais e a partir destes dados compreender melhor o sistema físico proposto.

Palavras-chave: Equação de Fokker-Planck. Distribuição de Probabilidades. Tempo de Passagem.

## **ABSTRACT**

The objective of this work is to study the relationship Fokker-Planck equation a Schrödinger-type equation . Thus, it is used supersymmetry for is to solve some polynomial potential in order to find the probability distribution,  $P(x, t)$ , and the passage time between barriers of potential. These data prit us a better understand of the proposed physical system.

Keywords: Fokker-Planck Equation, Probability Distribution, Passage Time.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 5.1- Funções de onda dos níveis de energia do problema original.....	32
Figura 5.2 - Representação do método de hierarquia de hamiltonianos com os autovalores e suas respectivas autofunções.....	33
Figura 6.1: Representação da energia livre $f(x)$ versus $x$ , equação (1) com $a=0,25$ e $c=-0,5$ .....	35
Figura 6.2: Representação da distribuição de probabilidade $P(x,t)$ versus $x$ para o potencial polinomial de ordem quatro para alguns tempos $t$ em unidades de tempo .....	41
Figura 7.1: Representação da energia livre $f(x)$ versus $x$ para equação (1) com $a=0,01$ , $b= -0,28$ e $c=1,75$ .....	42
Figura 7.2: Representação da distribuição de probabilidade $P(x,t)$ versus $x$ para o potencial polinomial de ordem seis para alguns tempos fixos em unidades de tempo.....	48
Figura 8.1: Representação do potencial efetivo do potencial biestável simétrico.....	50
Figura 8.2: Figura que representa a população $\Delta N(t)$ versus o tempo do potencial biestável simétrico.....	51
Figura 8.3: Figura que representa as probabilidades $N_1(t)$ e $N_2(t)$ versus o tempo do potencial biestável simétrico.....	51
Figura 8.4: Representação do potencial efetivo polinomial de ordem 6 versus $x$ .....	52
Figura 8.5: Figura que representa a população $\Delta N(t)$ versus o tempo do potencial polinomial de ordem 6.....	53
Figura 8.6: Figura que representa as probabilidades $N_1(t)$ e $N_2(t)$ versus o tempo do potencial polinomial de ordem 6.....	54

## LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1: Valores minimizados de  $a_n$ ,  $c_n$  e autovalores de energia obtidos através do formalismo supersimétrico e Método Variacional.....40

Tabela 7.1: Valores dos parâmetros  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $c_n$  e autovalores de energia obtidos através do formalismo supersimétrico e Método Variacional.....47

## SUMÁRIO

Capítulo 1- Introdução.....	12
Capítulo 2- Equação de Fokker Planck.....	16
Capítulo 3- Método de Solução.....	19
Solução Estacionária.....	19
Solução Temporal.....	20
Capítulo 4- Associação da Equação de Fokker-Planck à Equação de Schrödinger...	23
Capítulo 5- Formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica.....	28
Capítulo 6- Potencial Biestável Simétrico.....	35
Capítulo 7- Potencial Polinomial de Ordem 6.....	42
Capítulo 8- Resultados Numéricos.....	49
Capítulo 9- Conclusões e Perspectivas.....	56
Referências Bibliográficas.....	57

## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

A equação de Fokker-Planck (EFP) assim intitulada por Adriaan Fokker (físico e músico neerlandês) e Max Planck (físico alemão), foi inicialmente aplicada ao movimento Browniano. Este movimento consiste na agitação aleatória de partículas em suspensão em um meio fluido. O primeiro cientista a estudar o fenômeno, em 1827, foi o botânico escocês Robert Brown. Esta equação pode ser obtida da equação de Langevin (físico francês) e fornece a probabilidade de encontrar determinada partícula em uma posição  $x$  em um tempo  $t$  [1]. Há outras aplicações da equação de Fokker-Planck descritas na literatura, por exemplo, estudos de tensor de atrito molecular para movimentos rotacionais e translacionais de partículas Brownianas próximas a superfícies, análise do comportamento de íons grandes ou pesados em fluidos submetidos a campo elétrico e enovelamento de proteínas [2-5]. A EFP unidimensional, é dada:

$$\frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) \cdot P(x,t)] = \frac{\partial P(x,t)}{\partial t}, \quad (1.1)$$

sendo que  $P(x,t)$  é a distribuição de probabilidade,  $f(x)$  é a força quando  $x$  representar a velocidade,  $\Gamma$  é a constante relacionada com o coeficiente de difusão. A parte espacial pode ser mapeada em uma equação tipo Schrödinger:

$$-\frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \psi_n(x)}{\partial x^2} + V_{\text{ef}} \psi_n(x) = -\Lambda_n \psi_n(x), \quad (1.2)$$

sendo que  $\lambda_n$  são os autovalores de energia e  $V_{\text{ef}}$  é o potencial efetivo. A solução da equação de Fokker-Planck pode ser escrita como um somatório de funções, assim se obtém a distribuição de probabilidade de determinada partícula em uma posição  $x$ , a parte temporal quando o potencial efetivo  $V_{\text{ef}}$  não depende explicitamente do tempo, é descrita por uma exponencial, e a solução geral do problema é a multiplicação de ambas as soluções:

$$P(x,t) = P(x) T(t) \quad (1.3)$$

Seguido este procedimento, pode-se notar que a equação de Fokker-Planck pode ser relacionada com a equação de Schrödinger, porém suas constantes não necessariamente precisam ter as mesmas dimensões, e a consequência disto é que a solução da EFP pode ser obtida de uma equação tipo Schrödinger. Assim, obtém-se a distribuição de probabilidade  $P(x, t)$  como solução.

Na natureza existem partículas conhecidas como elétrons, prótons, nêutrons, píons, fótons, múons, entre outras e tais partículas podem ser divididas em férmions e bósons. Os férmions como, por exemplo, o elétron, têm algumas características como: dois férmions não podem ocupar o mesmo estado, que é o princípio de exclusão proposto pelo físico austríaco Pauli, têm spins com valores semi-inteiros, anticomutam entre si, e etc. Já os bósons, como por exemplo, o fóton, não estão sujeitos a princípios de exclusão para ocupar estados e assim podem gerar condensados, têm spins com valores inteiros, comutam entre si. No contexto da física de partículas e campos floresce o conceito da supersimetria, que busca relacionar partículas que obedecem à estatística de Bose-Einstein (bósons) e partículas que obedecem à estatística de Fermi-Dirac (férmions). A junção da teoria supersimétrica com a teoria quântica gerou a mecânica quântica supersimétrica [6], teoria proposta pelo físico e matemático estadunidense Edward Witten [7], com intuito de se compreender melhor a quebra dinâmica de supersimetria proposta para entendimento da natureza. Uma aplicação dessa propriedade em mecânica quântica é resolver problemas usando o método de fatorização, que consiste em usar operadores de criação e destruição, aqui representados, respectivamente, como  $A^+$  e  $A^-$ .

Muitas transformações ocorridas na física no século XX, levaram à formulação da física quântica, em especial em dezembro de 1900, quando Max Planck, físico alemão, tentou explicar o espectro de radiação do corpo negro, introduzindo uma constante, conhecida hoje como constante de Planck. O corpo negro pode ser representado por um orifício aberto em um corpo oco, onde toda radiação incidente no mesmo é absorvida, nenhuma radiação é refletida quando este se encontra em baixas temperaturas, sua densidade espectral de energia independe de características particulares, dependendo apenas da frequência da radiação e da temperatura [8]. Max Planck, considerado pai da física quântica, na tentativa de explicar os resultados obtidos primeiramente por Gustav Kirchhoff em 1860, no seu estudo sobre a espectroscopia dos gases e também os estudos experimentais de Lummer & Pringsheim e de Rubens & Kurlbaum, pesquisadores do Physikalisch Technische Reichsanstalt (Instituto Alemão), propõe a quantização da energia [8]. Os novos conceitos da física desenvolvidos de estudos de grandes cientistas como Lise Meitner (física austríaca), Maria Göppert-Mayer (física alemã), Emmy Noether (matemática alemã), Erwin Schrödinger (físico austríaco), Werner Heisenberg (físico alemão), Niels Bohr (físico dinamarquês), entre outras pessoas, têm como escopo estudar sistemas microscópicos como, por exemplo, molecular, atômico e subatômico, onde os formalismos clássicos não se aplicam mais, fazendo-se necessário novas

considerações e conceitos, formalizando assim uma nova teoria conhecida como física moderna, precisamente física quântica.

Em mecânica quântica,  $\psi$  é a função de onda de um sistema e  $|\psi^2|$  descreve a probabilidade de encontrar a partícula em uma determinada região, ou seja, sua densidade de probabilidade. Algumas vezes as partículas tem comportamento corpuscular e outros ondulatório, esta característica é conhecida como dualidade onda-partícula. Esta função de onda é a solução para a equação de Schrödinger, que é umas das equações mais importantes desta teoria [9], representada logo abaixo:

$$H \psi = E \psi, \quad (1.4)$$

onde H é o hamiltoniano e E a energia do problema.

Com estas teorias, pode-se resolver os potenciais polinomiais propostos neste trabalho, calcular o tempo de passagem, chamado também de tempo característico ( $t_c$ ), de uma barreira de um mínimo de potencial para outro através das probabilidades totais em função do tempo. Em um potencial biestável, como barreira de potencial em  $x=0$  a população em torno do mínimo é obtida fazendo suas integrais em torno de cada mínimo, sendo a integral de um lado nomeada por  $N_1$  e do outro por  $N_2$ . Para este fim, fez-se o uso das seguintes expressões:

$$N_1(t) = \int_{-\infty}^0 P(x, t) dx, \quad (1.5)$$

$$N_2(t) = \int_0^{\infty} P(x, t) dx . \quad (1.6)$$

O tempo característico do problema está relacionado com a diferença das integrais (1.5) e (1.6).

Mas por que usar mecânica quântica supersimétrica (MQS)? A motivação para usar mecânica quântica supersimétrica é que em mecânica quântica há soluções da equação de Schrödinger para os problemas como o átomo de hidrogênio, oscilador harmônico, potencial escada, poço de potencial finito, poço de potencial infinito entre outros, mas há aqueles que não se consegue resolução com os métodos tradicionalmente usados, então invocando a MQS com suas técnicas de solução de equações diferenciais, torna a trazer esperança de solução de outros potenciais que descrevem seus respectivos sistemas que descrevem a natureza. Pode-se estudar o sistema com energia potencial polinomial de ordem 4, que têm dois mínimos em sua representação gráfica, lançando mão da mecânica quântica supersimétrica e estender a aplicação do método para potencial onde há 3 mínimos, como acontece no potencial polinomial de ordem 6. Considerando que esses potenciais possam descrever algum

sistema, por exemplo, o processo de *folding* de uma proteína, pode-se considerar o potencial de ordem quatro, com dois mínimos, como o processo de enovelamento de uma determinada proteína, e o potencial de ordem seis que têm três mínimos, pode-se considerar que tal processo proteico tem um estado intermediário, e assim aplicar o método de resolução para o potencial sem estado intermediário e estendê-lo para o segundo potencial, dito com estado intermediário. Também, pode-se obter o tempo característico ( $t_c$ ), que é o tempo que o sistema gasta para atravessar a barreira de energia do problema, e assim questionar o quanto um estado intermediário pode interferir ou não no tempo característico do processo estudado.

## CAPÍTULO 2

### EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK

A equação de Langevin em uma variável pode ser escrita [10]:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t), \quad (2.1)$$

sendo que  $x$  é uma coordenada generalizada que pode ser a posição ou velocidade, por exemplo, se  $x$  for a velocidade  $f(x)$  representa a força e  $\zeta(t)$  descreve o ruído estocástico. Admite-se que este ruído têm as seguintes propriedades:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad (2.2)$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (2.3)$$

ou seja,  $\zeta(t)$  e  $\zeta(t')$  não dependem uma da outra para  $t=t'$  e em média, tem valor nulo, e  $\Gamma$  é uma constante relacionada com o coeficiente de difusão.

Como  $P(x,t)$  é a distribuição de probabilidade e  $W(x, t + \Delta t|x', t)$  a probabilidade de transição entre os estados [1], estas transições são causadas pela ocorrência de eventos, tal que:

$$P(x, t + \Delta t) = \int W(x, t + \Delta t|x', t)P(x', t)dx'. \quad (2.4)$$

Considerando transições entre estados próximos  $\Delta x = x - x' \rightarrow 0$ , para se obter a EFP, pode-se expandir  $W(x, t + \Delta t|x', t)P(x', t)$  em série de Taylor até segunda ordem.



$$\begin{aligned}
W(x, t + \Delta t|x', t)P(x', t) &= W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)P(x, t) - \\
&\Delta x \left[ (W(x, t + \Delta t|x, t))' P(x, t) + W(x, t + \Delta t|x, t) (P(x, t))' \right] + \\
\frac{\Delta x^2}{2} &\left[ (W(x, t + \Delta t|x, t))'' P(x, t) + W(x, t + \Delta t|x, t)' (P(x, t))' + \right. \\
&W(x, t + \Delta t|x, t)' (P(x, t))' + W(x, t + \Delta t|x, t) (P(x, t))'' \left. \right], \tag{2.5}
\end{aligned}$$

esta equação pode ser reescrita:

$$\begin{aligned}
W(x, t + \Delta t|x', t)P(x', t) &= W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)P(x, t) - \\
&\Delta x \left[ \frac{\partial}{\partial x} (W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)) P(x, t) + W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t) \frac{\partial}{\partial x} (P(x, t)) \right] + \\
\frac{\Delta x^2}{2} &\left[ \frac{\partial^2 W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x^2} P(x, t) + 2 \frac{\partial W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \right. \\
&W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t) \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \left. \right]. \tag{2.6}
\end{aligned}$$

Substituindo esta expansão na equação (2.4) e integrando em  $d(\Delta x)$ , pode-se obter:

$$\begin{aligned}
P(x, t + \Delta t) &= \int \left\{ W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)P(x, t) - \Delta x \left[ \frac{\partial}{\partial x} (W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)) P(x, t) + \right. \right. \\
&W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t) \frac{\partial}{\partial x} (P(x, t)) \left. \right] + \frac{\Delta x^2}{2} \left[ \frac{\partial^2 W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x^2} P(x, t) + \right. \\
&2 \frac{\partial W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t) \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \left. \right] \left. \right\} d(\Delta x). \tag{2.7}
\end{aligned}$$

Com as definições anteriores pode-se reescrever a equação (2.7) como:

$$\begin{aligned}
P(x, t + \Delta t) - P(x, t) &= - \frac{\partial \langle \Delta x \rangle}{\partial x} P(x, t) - \langle \Delta x \rangle \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \langle \Delta x^2 \rangle}{\partial x^2} P(x, t) + \\
&\frac{\partial \langle \Delta x^2 \rangle}{\partial x} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \langle \Delta x^2 \rangle \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \tag{2.8}
\end{aligned}$$

Lançando mão das equações (2.2) e (2.3) propostas no início, como as propriedades do ruído, pode-se escrever  $\langle \Delta x \rangle$  e  $\langle \Delta x^2 \rangle$  da seguinte maneira:

$$\langle \Delta x \rangle = f(x)\Delta t + \int_t^{t+\Delta t} \langle \zeta(t') \rangle dt' = f(x)\Delta t \quad \text{e} \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned} \langle \Delta x^2 \rangle = & [f(x)]^2 \Delta t^2 + 2f(x)\Delta t \int_t^{t+\Delta t} \langle \zeta(t') \rangle dt' + \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' d\tau \langle \zeta(t')\zeta(\tau) \rangle = \\ & [f(x)]^2 \Delta t^2 + \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Gamma \delta(t' - \tau). \end{aligned} \quad (2.10)$$

A mudança dos limites de integração da função delta de Dirac para o período de  $-\infty$  a  $\infty$ , pode ser feita uma vez que a função decresce rapidamente para outros valores de  $t$  e está concentrada em  $t' = \tau$ . Assim:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = [f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \int_t^{t+\Delta t} dt' = [f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t. \quad (2.11)$$

Com estes resultados substituídos na equação (2.8), alcançou-se:

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t) - P(x, t) = & - \frac{\partial [f(x)\Delta t]}{\partial x} P(x, t) - f(x)\Delta t \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t}{\partial x^2} P(x, t) + \\ & \frac{\partial [f(x)^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t]}{\partial x} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} [[f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t] \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Dividindo-se ambos os lados por  $\Delta t$  e considerando o limite de  $\Delta t \rightarrow 0$ , a equação (2.12) pode ser reescrita:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) \cdot P(x, t)]. \quad (2.13)$$

A equação acima é conhecida como equação de Fokker e Planck que descreve a evolução temporal da probabilidade  $P(x, t)$ .

## CAPÍTULO 3

### MÉTODO DE SOLUÇÃO

A solução da equação de Fokker-Planck se dá em duas etapas, a primeira consiste em encontrar a solução estacionária e a outra a solução dependente do tempo.

#### Solução Estacionária

Equação de Fokker Planck, obtida anteriormente (2.13):

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) \cdot P(x, t)]. \quad (3.1)$$

Esta equação pode ser reescrita em termos da corrente de probabilidade  $J(x, t)$ . Assim, tem-se uma equação de continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t). \quad (3.2)$$

Pode-se integrar esta equação em relação a  $x$ , supondo que tenha valor definido em um intervalo  $[a_1, a_2]$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{a_1}^{a_2} P(x, t) dx = -[J(a_2, t) - J(a_1, t)]. \quad (3.3)$$

O lado esquerdo é nulo, pois a densidade de probabilidade deve estar normalizada em qualquer tempo, ou seja, pode-se escrever as condições de contorno:

$$J(a_2, t) = J(a_1, t) \quad (3.4)$$

No regime estacionário o sistema tem propriedades que não variam com o tempo, neste caso, a distribuição de probabilidade independe de  $t$  implicando também que a corrente de probabilidade independe do tempo. Pode-se também inferir que como o lado esquerdo da equação (3.2) se anula, a corrente de probabilidade não depende também de  $x$ , assim terá o mesmo valor para qualquer  $x$ . Condições de contorno são conjuntos de restrições sobre um sistema usadas para regularizar seu comportamento em determinado domínio. Aqui se faz uso da denominada condição

de contorno refletora, como dito anteriormente, a corrente de probabilidade se anula para qualquer instante, ou seja,  $J(a_2, t) = J(a_1, t) = 0$ . Uma vez que a corrente se anula nos extremos do intervalo, também se anula em todo o intervalo. Então:

$$J(x, t) = -\frac{\Gamma}{2} \frac{\partial}{\partial x} P(x) + f(x) \cdot P(x) = 0 \quad (3.5)$$

A equação (3.5), é uma equação diferencial de primeira ordem e pode ser resolvida pelo método de separação de variáveis, na qual isola-se a derivada em relação à  $x$ :

$$\frac{1}{P(x)} \frac{\partial}{\partial x} P(x) = \frac{2}{\Gamma} f(x), \quad (3.6)$$

ou ainda escrevendo em termos da função logaritmo natural  $\ln$  e considerando que a força generalizada  $f(x)$  está relacionada com um potencial generalizado  $V(x)$ , tem-se:

$$\frac{d}{dx} \ln[P(x)] = \frac{2}{\Gamma} \left[ -\frac{d}{dx} V(x) \right]. \quad (3.7)$$

Integrando ambos os lados, tem-se:

$$\ln[P(x)] = -\frac{2}{\Gamma} V(x) + \text{constante}. \quad (3.8)$$

Assim, a solução para a equação independente do tempo, é dada:

$$P(x) = \exp \left[ -\frac{2}{\Gamma} V(x) + \text{constante} \right] = K \exp \left[ -\frac{2}{\Gamma} V(x) \right], \quad (3.9)$$

que representa a solução para o caso estacionário, sendo que  $K$  é a constante de normalização.

### Solução Temporal

Para obter a evolução temporal da distribuição de probabilidade, resolve-se a equação Fokker-Planck em uma variável em sua forma completa:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) \cdot P(x,t)]. \quad (3.10)$$

Uma maneira de obter a solução é escrever a equação (3.10) em termo do operador de evolução temporal  $w$  que age sobre funções  $Z(x)$ . Operadores são entidades matemáticas que atuam em funções. No presente caso, tem-se:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = wP(x,t), \quad (3.11)$$

E+ pode-se escrever o operador  $w$  atuando na função  $Z(x)$  como :

$$wZ(x) = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} Z(x) - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) \cdot Z(x)], \quad (3.12)$$

para tais funções  $Z(x)$  em que o operador  $w$  atua é válido a seguinte propriedade:

$$\int_{a_1}^{a_2} w Z(x) dx = 0. \quad (3.13)$$

Pode-se inferir por esta propriedade que a distribuição de probabilidade  $P(x,t)$  está normalizada para qualquer valor de tempo maior que zero, desde que esteja normalizada em  $t = 0$ . Da equação (3.11), pode-se obter a seguinte propriedade que satisfaz a distribuição de probabilidade estacionária  $P(x,0)$ :

$$wP(x,0) = 0. \quad (3.14)$$

Utilizando o operador  $w$ , pode-se escrever a equação de Fokker e Planck da seguinte maneira:

$$P(x,t) = P(x,0)e^{tw}. \quad (3.15)$$

Supondo que  $w$  tem autovalores discretos, ou seja:

$$wZ_n(x) = \Lambda_n Z_n(x), \quad (3.16)$$

sendo que  $Z_n(x)$  são as autofunções e  $\Lambda_n$  são os autovalores do operador  $w$ .  $P(x, 0)$  admite a expansão:

$$P(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n Z_n(x)]. \quad (3.17)$$

Substituindo a equação (3.17) na equação (3.15), tem-se a solução da equação de Fokker Planck (3.10), proposta inicialmente:

$$P(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n Z_n(x)] e^{t\Lambda_n} = a_0 Z_0(x) e^{t\Lambda_0} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n Z_n(x)] e^{t\Lambda_n}. \quad (3.18)$$

Observando as equações (3.14) e (3.16), pode-se inferir que o primeiro autovalor  $\Lambda_0$  da equação (3.18) é nulo. Se o primeiro autovalor é nulo os outros autovalores  $\Lambda_n$  devem ser negativos, pois para tempos grandes, por exemplo,  $t \rightarrow \infty$ , a distribuição de probabilidade  $P(x,t)$ , torna-se a solução estacionária  $P(x) = Z_0(x)$  que corresponde ao estado fundamental da equação (3.17), uma vez que  $a_0 = 1$ . Para enfatizar o fato dos autovalores serem negativos, adotou-se a notação  $\Lambda_n = -|\Lambda_n|$ , assim sendo, tem-se a distribuição de probabilidade dependente do tempo:

$$P(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n Z_n(x)] e^{-t|\Lambda_n|} \quad (3.19)$$

## CAPÍTULO 4

### ASSOCIAÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK À EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

A equação de Fokker-Planck, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = L_{FP}P(x,t), \quad (4.1)$$

sendo que  $L_{FP}$  é o operador Fokker –Planck. Uma vez que o lado esquerdo da equação independe do tempo. Este operador age sobre funções  $\phi(x)$  e é dado por:

$$L_{FP}\phi(x) = -\frac{\partial}{\partial x}f(x)\phi(x) + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x). \quad (4.2)$$

Supõe-se que o operador  $L_{FP}$  tenha espectro discreto, sua correspondente equação é dada da seguinte forma:

$$L_{FP}\phi_n(x) = \Lambda_n \phi_n(x). \quad (4.3)$$

sendo que para este operador  $L_{FP}$ ,  $\phi_n(x)$  são as autofunções e  $\Lambda_n$  são os autovalores. O operador  $L_{FP}$  não é hermitiano (operador linear), sendo assim, faz-se uma transformação sobre o operador de Fokker-Planck para obter um operador hermitiano  $L$ .

$$L\psi_n(x) = \frac{L_{FP}[\psi_0(x)\psi_n(x)]}{\psi_0(x)}, \quad (4.4)$$

o novo operador  $L$  tem como autofunções  $\psi_n(x)$ , escritas como:

$$\psi_n(x) = \frac{\phi_n(x)}{\psi_0(x)}. \quad (4.5)$$

Usando a definição do espectro discreto de  $L_{FP}$  conjuntamente com as autofunções de  $\psi_n(x)$  a equação (4.4) pode ser reescrita:

$$L\psi_n(x) = \frac{L_{FP}[\psi_0(x)\psi_n(x)]}{\psi_0(x)} = \frac{L_{FP} \phi_n(x)}{\psi_0(x)} = \frac{\Lambda_n \phi_n(x)}{\psi_0(x)} = \Lambda_n \psi_n(x). \quad (4.6)$$

Assim, da relação anterior, pode-se inferir que  $L_{FP}$  e  $L$  têm os mesmos autovalores. Pode-se encontrar a forma matemática do operador  $L$  utilizando a definição dada na equação (4.2) de  $L_{FP}$  e substituindo na equação (4.4) :

$$L\psi_n(x) = \frac{1}{\psi_0(x)} \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} (f(x)\psi_0(x)\psi_n(x)) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_0(x)\psi_n(x) \right\}, \quad (4.7)$$

pode-se aplicar a regra do produto na primeira derivada e a segunda derivada da equação (4.7), abrir em duas de primeira ordem e dividir ambos os termos por  $\psi_0(x)$  obter:

$$L\psi_n(x) = \left\{ -\psi_n(x) \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{f(x)\psi_n(x)}{\psi_0(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_0(x) - f(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_n(x) + \frac{\Gamma}{2} \left[ \frac{2}{\psi_0(x)} \frac{\partial \psi_0(x)}{\partial x} \frac{\partial \psi_n(x)}{\partial x} + \frac{\partial^2 \psi_n(x)}{\partial x^2} + \frac{\psi_n(x)}{\psi_0(x)} \frac{\partial^2 \psi_0(x)}{\partial x^2} \right] \right\}, \quad (4.8)$$

Lembrando que pode escrever  $P(x) = \psi_0^2(x) \rightarrow \psi_0(x) = [P(x)]^{1/2}$ , aplicar o logaritmo em ambos os lados e derivá-los em relação a  $x$ , e obter:

$$\frac{\partial}{\partial x} \{\ln[\psi_0(x)]\} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \{\ln[P(x)]\}, \quad (4.9)$$

fazendo-se uso da equação (3.6) do capítulo 3, pode-se reescrever a equação (4.9):



$$\frac{\partial}{\partial x} \{\ln[\psi_0(x)]\} = \frac{f(x)}{\Gamma}. \quad (4.10)$$

Reescrevendo a equação (4.8), tem-se:

$$L\psi_n(x) = \left\{ -\psi_n(x) \frac{\partial}{\partial x} f(x) - f(x)\psi_n(x) \frac{f(x)}{\Gamma} - f(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_n(x) + \frac{\Gamma}{2} \left[ 2 \frac{f(x)}{\Gamma} \frac{\partial \psi_n(x)}{\partial x} + \frac{\partial^2 \psi_n(x)}{\partial x^2} + \frac{\psi_n(x)}{\psi_0(x)} \frac{\partial^2 \psi_0(x)}{\partial x^2} \right] \right\}. \quad (4.11)$$

Escrevendo o termo  $\frac{1}{\psi_0(x)} \frac{\partial^2 \psi_0(x)}{\partial x^2}$  usando a equação (4.10), tem-se:

$$\frac{1}{\psi_0(x)} \frac{\partial^2 \psi_0(x)}{\partial x^2} = \frac{1}{\psi_0(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{f(x)}{\Gamma} \psi_0(x) \right\} = \frac{[f(x)]^2}{\Gamma} + \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial f(x)}{\partial x}. \quad (4.12)$$

Substituindo equação (4.10) na equação (4.11) e utilizando a equação (4.12), pode-se obter a equação do operador hermitiano da EFP:

$$L\psi_n(x) = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{[f(x)]^2}{\Gamma} - \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right\} \psi_n(x) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \psi_n(x)}{\partial x^2}, \quad (4.13)$$

das relações acima pode-se notar a semelhança dos seguintes operadores:

$$L = -V_{\text{ef}} + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (4.14)$$

$$H = V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (4.15)$$

O primeiro operador é hermitiano, obtido a partir da EFP e o segundo é o operador hamiltoniano da equação de Schrödinger, ambos são similares com rearranjo de constantes, considerando  $\frac{\Gamma}{2} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}$  e os potenciais  $V_{\text{ef}} \rightarrow V$ , as duas equações se

identificam formalmente. A equação tipo Schrödinger para o problema analisado, pode ser descrita:

$$-\frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \psi_n(x)}{\partial x^2} + Vef \psi_n(x) = -\Lambda_n \psi_n(x), \quad (4.16)$$

onde  $Vef$  é o potencial efetivo,  $\Gamma$  constante relacionada com o coeficiente de difusão. As soluções encontradas na mecânica quântica podem ser mapeadas aos processos estocásticos devido à similaridade das equações que descreve os sistemas, vistas anteriormente. Encontradas as energias e autovalores da equação tipo Schrödinger, pode-se escrever a distribuição de probabilidade  $P(x,t)$ , pela transformação dada na equação (4.5), a solução da equação de Fokker-Planck usando as autofunções do operador hermitiano são obtidas por:

$$P(x,t) = \psi_0(x) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x) e^{-t|\Lambda_n|}. \quad (4.17)$$

Para encontrar as constantes  $a_n$  da equação (4.17), multiplica-se ambos os lados da equação (4.17) por  $\frac{\psi_m(x)}{\psi_0(x)}$  e integra em relação a  $x$ , considera  $t=0$  para tirar a parte temporal.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t) \frac{\psi_m(x)}{\psi_0(x)} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_0(x) \psi_n(x) \frac{\psi_m(x)}{\psi_0(x)} dx, \quad (4.18)$$

reescrevendo a equação acima:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t=0) \frac{\psi_m(x)}{\psi_0(x)} dx = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_m(x) dx. \quad (4.19)$$

Considera-se a propriedade de ortogonalidade, isto é:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_m(x) dx = 1, \text{ se } n = m \quad (4.20)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x)\psi_m(x) dx = 0, \text{ se } n \neq m, \quad (4.21)$$

Então, os coeficientes são dados por:

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t = 0) \frac{\psi_n(x)}{\psi_0(x)} dx. \quad (4.22)$$

Usando como condição inicial  $P(x, t = 0) = \delta(x - x_0)$ , pode-se escrever:

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) \frac{\psi_n(x)}{\psi_0(x)} dx, \quad (4.23)$$

pela propriedade da função delta, os coeficientes  $a_n$  são dados por:

$$a_n = \frac{\psi_n(x_0)}{\psi_0(x_0)}. \quad (4.24)$$

Assim, a solução geral da equação de Fokker-Planck com a condição inicial  $P(x, t=0) = \delta(x - x_0)$  substituindo a equação (4.24) na equação (4.17) será:

$$P(x, t) = \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(x_0)} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_0)\psi_n(x) e^{-t|\Lambda_n|}. \quad (4.25)$$

## CAPÍTULO 5

### FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA SUPERSIMÉTRICA

Inicialmente, admite que a energia livre  $[f(x)]$  do problema que se quer resolver é conhecida. Porém na equação tipo Schrödinger, usa-se o potencial efetivo  $[V_{ef}(x)]$ , a equação que relaciona a energia livre com o potencial efetivo, já escrevendo as constantes de forma conveniente, é dada [1]:

$$V_{ef}(x) = \frac{D}{2} \left\{ \frac{\beta^2}{2} \left( -\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right)^2 - \beta \left( \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \right) \right\}, \quad (5.1)$$

onde  $D = \frac{\hbar^2}{2m}$  é a constante de difusão e  $\beta = 1/kT$  sendo  $k$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura. Tendo o potencial efetivo, pode o substituir na equação tipo Schrödinger a ser resolvida:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{V_{ef}(x)}{D}\psi(x) = -\frac{\lambda}{D}\psi(x). \quad (5.2)$$

Pela mecânica quântica supersimétrica pode resolver a equação diferencial acima. Usando esta abordagem a solução pode ser obtida estado por estado através do método de hierarquia de hamiltonianos, deve-se lembrar que não são todos os hamiltonianos que podem ser fatorizados e este método pode ser aplicado a um conjunto restrito de sistemas físicos.

Usando mecânica quântica supersimétrica, há dois operadores  $Q$  e  $Q^+$  que obedecem a relação de anticomutação [6]:

$$\{Q, Q^+\} = Q Q^+ + Q^+ Q = H_{ss}, \quad (5.3)$$

$$\{Q, Q\} = \{Q^+, Q^+\} = 0. \quad (5.4)$$

Essas relações são parte de uma álgebra que expressa o caráter bosônico e fermiônico com relações comutativas e anticomutativas. Considerando os seguintes operadores para desenvolvimento desta álgebra supersimétrica:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A^- & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad Q^+ = \begin{pmatrix} 0 & A^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

e assim, pode-se escrever o hamiltoniano supersimétrico como:

$$H_{ss} = \begin{pmatrix} A^+ A^- & 0 \\ 0 & A^- A^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^+ & 0 \\ 0 & H^- \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

sendo que  $A^+$  e  $A^-$  são chamados de operadores bosônicos para casos gerais, e o hamiltoniano supersimétrico pode ser escrito em termos de dois hamiltonianos  $H^+$  e  $H^-$ , conhecidos como companheiros supersimétricos. Fazendo-se uso das relações anteriores pode construir novos Hamiltonianos supersimetrizados, fatorizando-os para determinar seu superpotencial e, conseqüentemente, seus operadores bosônicos com relações simples entre suas autofunções e autovalores. Com este formalismo pode desenvolver um método para resolver a equação de Schrödinger. Através da inversão desses operadores bosônicos se tem o companheiro supersimétrico e por essa abordagem a solução pode ser obtida estado por estado através do método conhecido como hierarquia de Hamiltonianos [14]. Assim, considera-se um hamiltoniano original de partida para um problema unidimensional:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (5.7)$$

Na sequência, considerou-se  $\hbar = 2m = 1$  por simplificação. Admitindo-se que esse hamiltoniano pode ser escrito em termos dos operadores bosônicos:

$$A_1^+ = -\frac{d}{dx} + W_1(x) \text{ e } A_1^- = \frac{d}{dx} + W_1(x), \quad (5.8)$$

o primeiro hamiltoniano companheiro supersimétrico construído com os operadores bosônicos acima é:

$$H_{1,+} = H_0 - E_0^{(1)} = A_1^+ A_1^-, \quad (5.9)$$

pode-se notar que o superpotencial  $W_1$  deve obedecer à equação não linear proposta pelo conde italiano Jacopo Riccati, conhecida como equação de Riccati [11], exposta logo abaixo:

$$W_1^2 - W_1' + E_0^{(1)} = V(x). \quad (5.10)$$

Para obter a função de onda do estado fundamental  $[\psi_0]$  se aplica o operador bosônico de destruição nesta função de onda, o resultado deve ser igual a zero, ou seja  $A_1^- \psi_0 = 0$ . Assim sendo, a equação para encontrar a função de onda é:

$$\psi_0^{(1)} \propto \exp\left[-\int W_1(x)dx\right], \quad (5.11)$$

o companheiro supersimétrico de  $H_{1,+}$  é obtido invertendo os operadores bosônicos e este tem o autovalor de energia igual ao primeiro estado excitado de  $H_{1,+}$  :

$$H_{1,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) = A_1^- A_1^+, \quad (5.12)$$

ou, em termos de novos operadores, supondo que o hamiltoniano  $H_{1,-}$  possa ser fatorizado por novos operadores bosônicos :

$$H_{2,+} = H_{1,-} - E_0^{(2)} = A_2^+ A_2^-, \quad (5.13)$$

e os operadores bosônicos são dados em termo do novo superpotencial  $W_2$ :

$$A_2^+ = -\frac{d}{dx} + W_2(x) \text{ e } A_2^- = \frac{d}{dx} + W_2(x), \quad (5.14)$$

esse novo superpotencial  $W_2$  satisfaz a seguinte equação de Riccati:

$$W_2^2 - W_2' + E_0^{(2)} = V_2(x), \quad (5.15)$$

e o companheiro supersimétrico de  $H_2$  é obtido invertendo os operadores bosônicos:

$$H_{2,-} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_3(x) = A_2^- A_2^+. \quad (5.16)$$

Em geral,  $V_3(x)$  não é igual a  $V_2(x)$  que também não é igual ao potencial original. Se  $H_{2,-}$  puder ser fatorizado por novos operadores  $A_3^+$  e  $A_3^-$  a hierarquia pode ser continuada e assim se obtém:

$$H_{3,+} = H_{2,-} - E_0^{(3)} = A_3^+ A_3^-, \quad (5.17)$$

e é possível continuar a construção da hierarquia de hamiltonianos e se pode observar a relação entre os espectros e autofunções de cada hamiltoniano, pois todos estão relacionados pela simetria:

$$E_n^{(3)} = E_{n+1}^{(2)} = E_{n+2}^{(1)} \text{ e} \quad (5.18)$$

$$\psi_n^{(3)} \propto A_2^- \psi_{n+1}^{(2)} \propto A_2^- A_1^- \psi_{n+2}^{(1)}. \quad (5.19)$$

Quando se faz uma nova fatorização é subtraída uma constante, esta que é a diferença de energia entre o estado fundamental do hamiltoniano fatorizado e o estado fundamental de seu companheiro supersimétrico. Observando as funções de onda, quando se aplica os operadores bosônicos pode recuperar as funções de onda dos hamiltonianos anteriores, assim pode fazer as relações acima expostas. O processo de fatorização para formar a hierarquia de hamiltonianos pode ser feito  $n$  vezes, se os hamiltonianos descritos em cada fase puderem ser fatorizados, gerando uma família de hamiltonianos descritos pela supersimetria:

$$H_n = A_n^+ A_n^- + E_0^{(n)}, \quad (5.20)$$

e os operadores bosônicos descritos em termos dos superpotenciais  $W_n(x)$ , podem ser generalizados:

$$A_n^+ = -\frac{d}{dx} + W_n(x) \text{ e } A_n^- = \frac{d}{dx} + W_n(x). \quad (5.21)$$

Cada superpotencial proposto gera a função de onda de cada estado fundamental:

$$\psi_0^{(n)}(x) \propto \exp\left[-\int W_n(x) dx\right]. \quad (5.22)$$

Para obter as funções de onda dos níveis de energia do problema proposto inicialmente, faz-se necessário a aplicação dos operadores bosônicos quantas vezes for necessário, como ilustrada na figura 5.1:

Figura 5.1: Funções de onda dos níveis de energia do problema original.

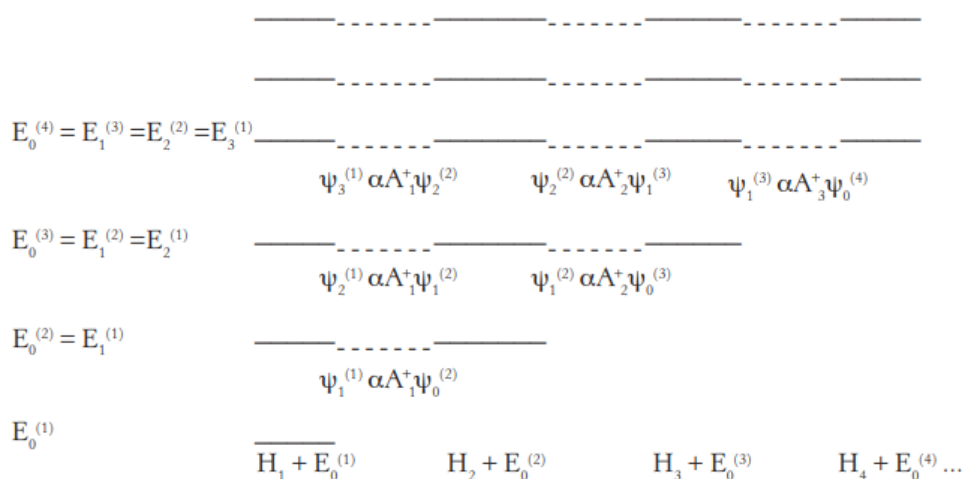
$$\begin{aligned}
 & \psi_0^1 \\
 & \psi_1^1 = A_1^+ \psi_0^2 \\
 & \psi_2^1 = A_1^+ A_2^+ \psi_0^3 \\
 & \psi_3^1 = A_1^+ A_2^+ A_3^+ \psi_0^4 \\
 & \psi_4^1 = A_1^+ A_2^+ A_3^+ A_4^+ \psi_0^5 \\
 & \psi_5^1 = A_1^+ A_2^+ A_3^+ A_4^+ A_5^+ \psi_0^6 \\
 & \quad \cdot \\
 & \quad \cdot \\
 & \quad \cdot \\
 & \psi_n^1 = A_1^+ A_2^+ A_3^+ A_4^+ A_5^+ \dots \dots \dots A_n^+ \psi_0^{(n+1)}
 \end{aligned}$$

Fonte: Feita pela autora.

Assim, esse método permite encontrar os autovalores e as autofunções do problema inicial que se quer estudar, ou seja, com a família de hamiltonianos encontrados pode encontrar a energia e suas funções de onda. Desta forma, tem-se toda a superfamília construída através do método inicialmente proposto. Um esquema do método descrito aqui é representado na figura (5.2).



Figura 5.2- Representação do método de hierarquia de hamiltonianos com os autovalores e suas respectivas autofunções.



Fonte: SUPERSIMETRIA APLICADA A MECÂNICA QUÂNTICA, 2009.

Por vezes, não se consegue formar toda a família de hamiltonianos, por exemplo, consegue apenas o primeiro hamiltoniano e com ele sua função de onda e energia do estado fundamental. Os potenciais que exibem tal característica são conhecidos como potenciais parcialmente solúveis, e os próximos estados excitados têm que ser obtidos por métodos aproximativos, dentre estes, há o método variacional. Este método é muito utilizado em física gerando soluções aproximadas em problemas que não se consegue obter uma solução analítica ou uma solução fechada [6]. Em termos do formalismo, ele consiste em propor um superpotencial gerando uma função teste cujo potencial é parecido com o potencial efetivo. Pode-se minimizar o valor médio do hamiltoniano em função de um ou mais parâmetro escolhido (parâmetros variacionais), quanto melhor a função teste proposta melhor é o resultado da minimização. Leva-se em conta o princípio variacional [12] que prediz que o autovalor obtido não terá valor menor do que o verdadeiro, no melhor caso podem ter valor igual. Eis o método descrito matematicamente:

$$E_n \leq \frac{\int \psi_\mu^*(x) H \psi_\mu(x) dx}{\int |\psi_\mu(x)|^2 dx}, \quad (5.23)$$

sendo que  $E_n$  é valor da energia do estado enumerado em questão ( $n$ ),  $\psi_\mu$  representa a função teste proposta com o parâmetro  $\mu$ , esta autofunção vem do método proposto anteriormente e  $H$  é o operador hamiltoniano do problema que se quer resolver. Muitas vezes o processo de minimização tem que ser feito numericamente, como no caso estudado aqui. Um software usado para esse fim é o *Wolfram Mathematica*, assim se obtém os parâmetros sugeridos no superpotencial e sua respectiva energia.

## CAPÍTULO 6

### POTENCIAL BIESTÁVEL SIMÉTRICO

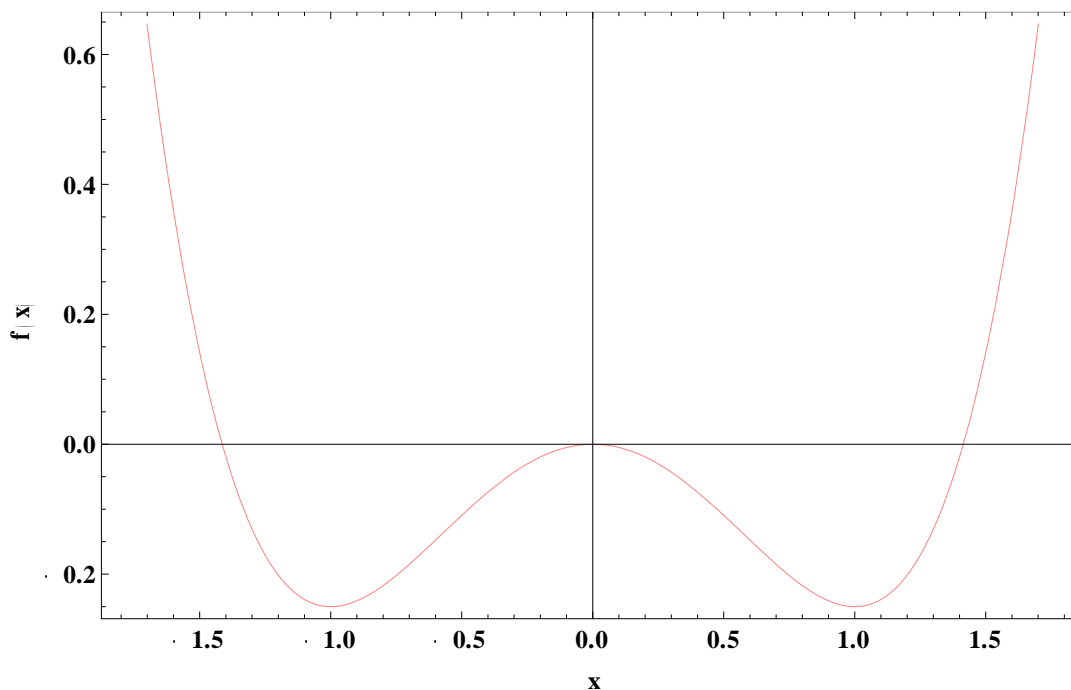
Inicialmente, estudou-se o problema físico cuja energia livre é dada [13]:

$$f(x) = a x^4 + c x^2, \quad (6.1)$$

sendo que  $a$  e  $c$  são constantes.

A energia livre é representada no gráfico mostrado na figura (6.1), com  $a=0,25$  e  $c=-0,5$ .

FIGURA 6.1: Representação da energia livre  $f(x)$  versus  $x$  do potencial biestável simétrico.



Fonte: Elaborada pela autora.

Substitui-se esta energia livre, equação (6.1) na equação abaixo:

$$V_{ef}(x) = \frac{D}{2} \left\{ \frac{\beta^2}{2} \left( -\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right)^2 - \beta \left( \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \right) \right\}, \quad (6.2)$$

e assim se obtém o potencial efetivo do problema:

$$\frac{V_{ef}(x)}{D} = \beta^2 \left\{ 4a^2 x^6 + 4acx^4 + \left( c^2 - \frac{6a}{\beta} \right) x^2 - \frac{c}{\beta} \right\}. \quad (6.3)$$

Substituindo o potencial efetivo acima no hamiltoniano original tem:

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{V_{ef}(x)}{D} = -\frac{d^2}{dx^2} + \beta^2 \left\{ 4a^2 x^6 + 4acx^4 + \left( c^2 - \frac{6a}{\beta} \right) x^2 - \frac{c}{\beta} \right\}. \quad (6.4)$$

A equação acima é considerada uma equação tipo Schrödinger e faz o uso do método de hierarquia de hamiltoniano para sua solução,  $H_0$  pode ser fatorizado em termos dos operadores bosônicos  $W_1$  e se tem o companheiro supersimétrico de  $H_0$ :

$$H_{1,+} = H_0 - E_0^{(1)} = A_1^+ A_1^-, \quad (6.5)$$

e os operadores bosônicos são dados por:

$$A_1^+ = -\frac{d}{dx} + W_1(x) \text{ e } A_1^- = \frac{d}{dx} + W_1(x). \quad (6.6)$$

Substituindo  $H_0$  e os operadores bosônicos na equação (6.5), tem-se:

$$H_{1,+} = -\frac{d^2}{dx^2} + \beta^2 \left\{ 4a^2 x^6 + 4acx^4 + \left( c^2 - \frac{6a}{\beta} \right) x^2 - \frac{c}{\beta} \right\} - E_0^{(1)} = A_1^+ A_1^-, \quad (6.7)$$

e assim tem a equação:

$$-\frac{d^2}{dx^2} + \beta^2 \left\{ 4a^2 x^6 + 4acx^4 + \left( c^2 - \frac{6a}{\beta} \right) x^2 - \frac{c}{\beta} \right\} - E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + W_1^2(x) - W_1'(x). \quad (6.8)$$

Como solução da equação (6.8), sugere o superpotencial  $W_1(x)$  na forma:

$$W_1(x) = 2\beta ax^3 + \beta cx, \quad (6.9)$$

fazendo a derivada primeira e elevando ao quadrado  $W_1(x)$ , pode substituir na equação (6.8) para ver se tal superpotencial sugerido a satisfaz, e assim se obtém o primeiro valor de energia:

$$E_0^{(1)} = 0. \quad (6.10)$$

Para o estado fundamental a solução é analítica ou exata, o superpotencial gera a função de onda do estado fundamental:

$$\psi_0^{(1)} \propto \exp\left[-\int W_1(x) dx\right] \propto \exp\left[-\frac{\beta}{2}(ax^4 + cx^2)\right]. \quad (6.11)$$

Continuando a hierarquia de hamiltonianos, o companheiro supersimétrico de  $H_{1,+}$  é obtido invertendo os operadores bosônicos:

$$H_{1,-} = A_1^- A_1^+, \quad (6.12)$$

Ou pode escrevê-lo em termos de novos operadores:

$$H_{2,+} = H_{1,-} - E_0^{(2)} = A_2^+ A_2^-, \quad (6.13)$$

sendo que os operadores bosônicos são escritos em termos do novo superpotencial  $W_2(x)$  sugerido:

$$A_2^+ = -\frac{d}{dx} + W_2(x) \text{ e } A_2^- = \frac{d}{dx} + W_2(x). \quad (6.14)$$

substituindo estes operadores bosônicos na equação (6.13) e igualando à equação (6.12), tem-se a nova equação de Riccati:

$$-\frac{d^2}{dx^2} + W_1^2(x) + W_1'(x) + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + W_2^2(x) - W_2'(x) + E_0^{(2)}, \quad (6.15)$$

substituindo o superpotencial sugerido, a equação acima pode ser reescrita:

$$\beta^2 \left\{ 4a^2 x^6 + 4acx^4 + \left( c^2 - \frac{6a}{\beta} \right) x^2 - \frac{c}{\beta} \right\} = -\frac{d^2}{dx^2} + W_2^2(x) - W_2'(x) + E_0^{(2)}. \quad (6.16)$$

Neste caso não se pode achar a solução para a equação (6.16) e sugere um superpotencial aproximado como:

$$W_2(x) = a_1 x^3 + c_1 x, \quad (6.17)$$

O superpotencial gera a função de onda:

$$\psi_0^{(2)} \propto \exp[-\int W_2(x) dx] \propto \exp\left[-\left(\frac{a_1}{4} x^4 + \frac{c_1}{2} x^2\right)\right]. \quad (6.18)$$

Aplica-se o operador bosônico  $A_1^+$  em  $\psi_0^{(2)}$  e se obtém a função de onda do primeiro estado excitado  $\psi_1^{(1)}$ . Como a equação (6.16) não tem solução direta tem que usar o método variacional para encontrar os parâmetros variacionais  $a_1$  e  $c_1$  do superpotencial  $W_2(x)$  sugerido e também para encontrar o valor da energia  $E_1^{(1)}$ . Continuando a hierarquia de hamiltonianos, o companheiro supersimétrico de  $H_{2,+}$  é obtido invertendo seus operadores bosônicos:

$$H_{2,-} = A_2^- A_2^+, \quad (6.19)$$

Ou pode escrevê-lo em termos de novos operadores:

$$H_{3,+} = H_{2,-} - E_0^{(3)} = A_3^+ A_3^-, \quad (6.20)$$

sendo que os operadores bosônicos são escritos em termos do novo superpotencial  $W_3(x)$  sugerido:

$$A_3^+ = -\frac{d}{dx} + W_3(x) \text{ e } A_3^- = \frac{d}{dx} + W_3(x). \quad (6.21)$$

substituindo estes operadores bosônicos na equação (6.20) e igualando à equação (6.19), tem-se a nova equação de Riccati:

$$-\frac{d^2}{dx^2} + W_2^2(x) + W_2'(x) + E_0^{(2)} = -\frac{d^2}{dx^2} + W_3^2(x) - W_3'(x) + E_0^{(3)}, \quad (6.22)$$

substituindo o superpotencial já encontrado, a equação acima pode ser reescrita:

$$(a_1x^3 + c_1x)^2 + (a_1x^3 + c_1x)' + E_0^{(2)} = W_3^2(x) - W_3'(x) + E_0^{(3)}, \quad (6.23)$$

neste caso também não se pode achar a solução para a equação (6.23) e sugere o superpotencial com a forma:

$$W_3(x) = a_2x^3 + c_2x, \quad (6.24)$$

o superpotencial gera a função de onda:

$$\psi_0^{(3)} \propto \exp\left[-\int W_3(x)dx\right] \propto \exp\left[-\left(\frac{a_2}{4}x^4 + \frac{c_2}{2}x^2\right)\right]. \quad (6.25)$$

Pode-se usar um software para encontrar a energia e os parâmetros variacionais e assim obter  $E_2^{(1)}$ ,  $a_2$ ,  $c_2$  e continuar a hierarquia aproximada de hamiltonianos. Fazendo o mesmo que anteriormente, o companheiro supersimétrico de  $H_{3,+}$  é obtido invertendo os operadores bosônicos e gera  $H_{3,-}$  ou pode escrevê-lo em termos de novos operadores gerando  $H_{4,+}$  e assim se encontra uma nova equação de Riccati que gera um novo superpotencial  $W_4(x)$ , e para encontrar os parâmetros variacionais e as energias subsequentes usou o método variacional. Os valores encontrados para a energia e os parâmetros  $a_1$  e  $c_1$  seguem na tabela (6.1).

Tabela 6.1: Valores minimizados de  $a_n$ ,  $c_n$  e autovalores de energia obtidos através do formalismo supersimétrico e Método Variacional.

n	Energia ( $E_n$ )	$a_n$	$c_n$
1	0,8178	0,1978	1,1899
2	3,5816	0,1643	1,5707
3	6,9930	0,1457	1,8395
4	10,8858	0,1333	2,0527
5	15,1708	0,1241	2,232

Fonte: Elaborada pela autora.

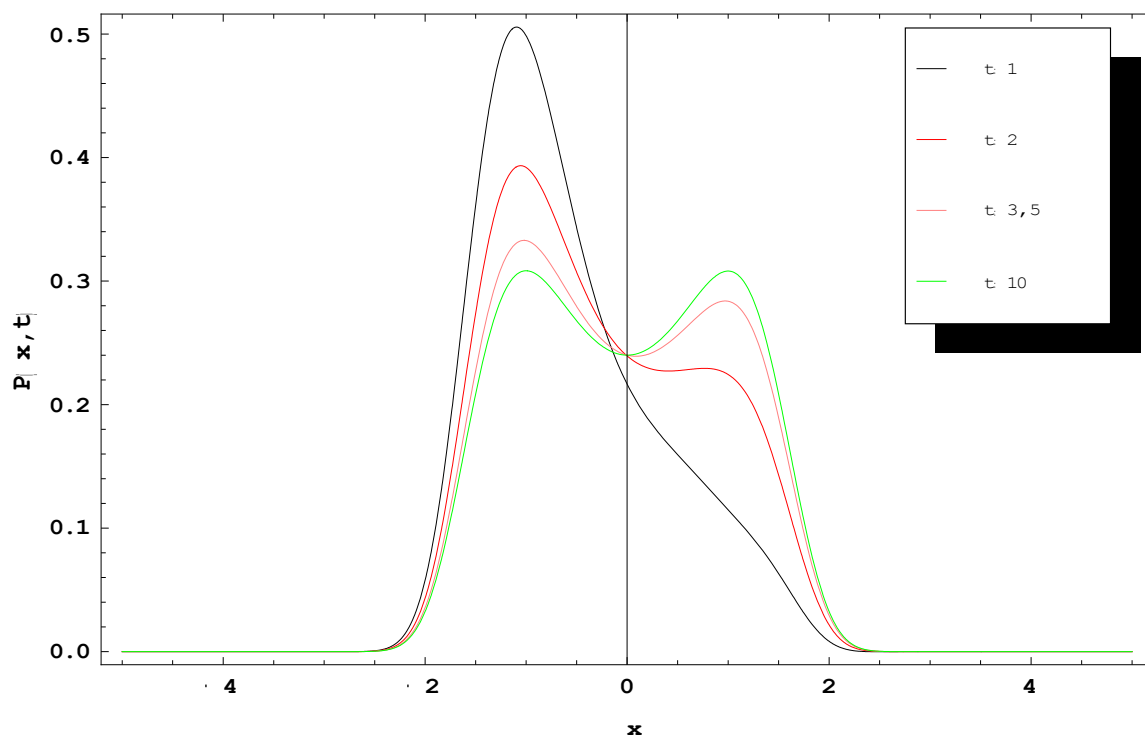
As funções de onda e energias encontradas anteriormente foram substituídas na equação de Fokker-Planck para obter a distribuição de probabilidade  $P(x,t)$ :

$$P(x,t) = \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(x_0)} \sum_{n=0}^{\infty} [\psi_n(x_0)\psi_n(x)] e^{-t|\lambda_n|}. \quad (6.26)$$

O gráfico apresentado na figura (6.2) expressa  $P(x,t)$  encontrado para este problema, o truncamento da série ocorreu para  $n=5$  equação (6.26), pois não se notou diferença significativa na curva de distribuição de probabilidades usando mais termos na série.



Figura 6.2: Representação da distribuição de probabilidade  $P(x,t)$  versus  $x$  para o potencial polinomial de ordem quatro para alguns tempos  $t$  em unidades de tempo.



Fonte: Elaborada pela autora.

Contemplando o gráfico da figura (6.2), pode-se inferir que a curva de distribuição de probabilidade se apresenta concentrada na região do primeiro mínimo do potencial para pequenos valores de tempo. Isso ocorre como consequência direta da condição inicial utilizada  $P(x,t=0) = \delta(x - x_0)$ , para  $x_0 = -1$ , passando-se o tempo, a curva que representa a distribuição de probabilidade torna dividida entre os dois mínimos da distribuição e para valores de tempo maiores que 10, as curvas da distribuição de probabilidade apresentada, coincidem chegando no estado estacionário.

## CAPÍTULO 7

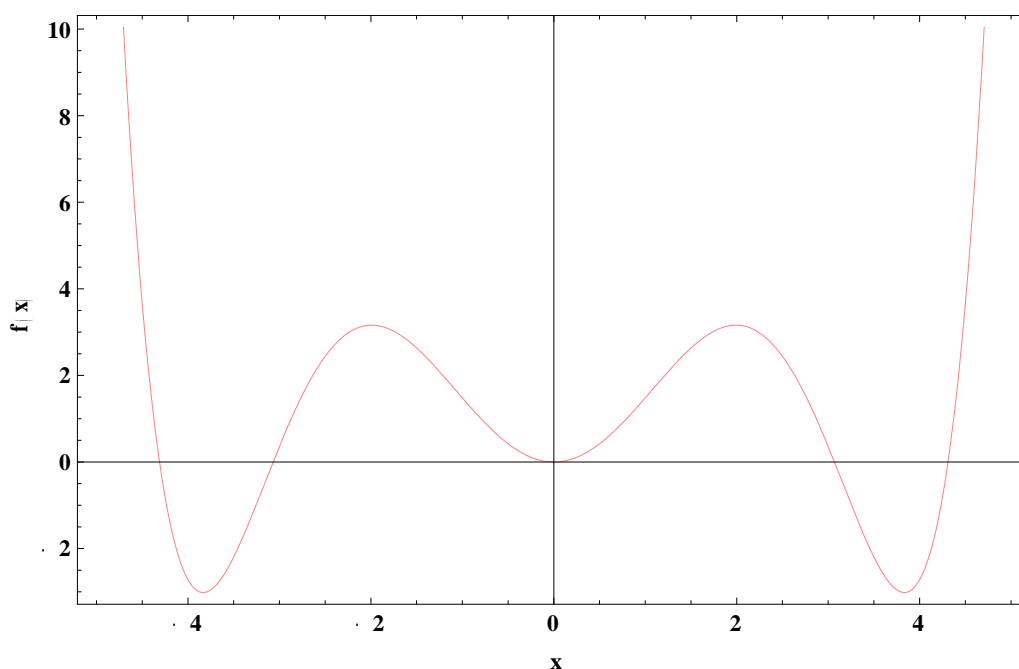
### POTENCIAL POLINOMIAL DE ORDEM 6

Dando continuidade aos estudos, propõe-se o problema cuja a energia livre é dada por:

$$f(x) = a x^6 + b x^4 + c x^2, \quad (7.1)$$

onde a, b e c são constantes. A curva da energia livre em função de x é representada no gráfico (7.1), com a=0,01, b= -0,28 e c=1,75.

Figura 7.1: Representação da energia livre f(x) versus x para equação (7.1) com a=0,01, b= -0,28 e c=1,75.



Fonte: Elaborada pela autora.

Substitui-se esta energia livre na equação abaixo:

$$V_{ef}(x) = \frac{D}{2} \left\{ \frac{\beta^2}{2} \left( -\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right)^2 - \beta \left( \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \right) \right\}, \quad (7.2)$$

e assim se obtém o potencial efetivo do problema:

$$\frac{V_{\text{ef}}(x)}{D} = \frac{1}{2} \left\{ -2c - 12bx^2 - 30ax^4 + \frac{1}{2}(-2cx - 4bx^3 - 6ax^5)^2 \right\}. \quad (7.3)$$

Substituindo o potencial efetivo na equação do hamiltoniano original tem:

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{V_{\text{ef}}(x)}{D} = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \left\{ -2c - 12bx^2 - 30ax^4 + \frac{1}{2}(-2cx - 4bx^3 - 6ax^5)^2 \right\}. \quad (7.4)$$

A equação acima é considerada uma equação tipo Schrödinger e faz o uso do método de hierarquia de hamiltoniano para sua solução,  $H_0$  pode ser fatorizado em termos dos operadores bosônicos  $W_1$  e se tem o companheiro supersimétrico de  $H_0$  :

$$H_{1,+} = H_0 - E_0^{(1)} = A_1^+ A_1^-, \quad (7.5)$$

e os operadores bosônicos são dados por :

$$A_1^+ = -\frac{d}{dx} + W_1(x) \text{ e } A_1^- = \frac{d}{dx} + W_1(x). \quad (7.6)$$

Substituindo  $H_0$  e os operadores bosônicos na equação (7.5), tem-se:

$$H_{1,+} = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \left\{ -2c - 12bx^2 - 30ax^4 + \frac{1}{2}(-2cx - 4bx^3 - 6ax^5)^2 \right\} = A_1^+ A_1^-, \quad (7.7)$$

e assim, tem-se a equação:

$$\frac{1}{2} \left\{ -2c - 12bx^2 - 30ax^4 + \frac{1}{2}(-2cx - 4bx^3 - 6ax^5)^2 \right\} - E_0^{(1)} = W_1^2(x) - W_1'(x), \quad (7.8)$$

como solução da equação (7.8), sugere-se o superpotencial  $W_1(x)$  na forma:

$$W_1(x) = 3ax^5 + 2bx^3 + cx, \quad (7.9)$$

fazendo a primeira derivada e elevando ao quadrado  $W_1(x)$ , pode-se substituir na equação (7.8) para ver se tal superpotencial sugerido a satisfaz, e assim obtém o primeiro valor de energia:

$$E_0^{(1)} = 0. \quad (7.10)$$

O superpotencial gera a função de onda do estado fundamental:

$$\psi_0^{(1)} \propto \exp[-\int W_1(x)dx] \propto \exp\left[-\left(\frac{3a}{6}x^6 + \frac{2b}{4}x^4 + \frac{c}{2}x^2\right)\right]. \quad (7.11)$$

Continuando a hierarquia de hamiltonianos, o companheiro supersimétrico de  $H_{1,+}$  é obtido invertendo os operadores bosônicos:

$$H_{1,-} = A_1^- A_1^+, \quad (7.12)$$

Ou pode escrevê-lo em termos de novos operadores:

$$H_{2,+} = H_{1,-} - E_0^{(2)} = A_2^+ A_2^-, \quad (7.13)$$

sendo que os operadores bosônicos são escritos em termos do novo superpotencial  $W_2(x)$  sugerido:

$$A_2^+ = -\frac{d}{dx} + W_2(x) \text{ e } A_2^- = \frac{d}{dx} + W_2(x), \quad (7.14)$$

substituindo estes operadores bosônicos na equação (7.13) e igualando à equação (7.12), tem-se a equação de Riccati associada ao problema:

$$-\frac{d^2}{dx^2} + W_1^2(x) + W_1'(x) + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + W_2^2(x) - W_2'(x) + E_0^{(2)}, \quad (7.15)$$

substituindo o superpotencial já encontrado, a equação acima pode ser reescrita:

$$(3ax^5 + 2bx^3 + cx)^2 + (3ax^5 + 2bx^3 + cx)' = W_2^2(x) - W_2'(x) + E_0^{(2)}, \quad (7.16)$$

Neste caso não se pode achar a solução para a equação (7.16) e sugere o superpotencial na seguinte forma:

$$W_2(x) = a_1x^5 + b_1x^3 + c_1x, \quad (7.17)$$

o superpotencial sugerido gera a função de onda:

$$\psi_0^{(2)} \propto \exp\left[-\int W_2(x)dx\right] \propto \exp\left[-\left(\frac{a_1}{6}x^6 + \frac{b_1}{4}x^4 + \frac{c_1}{2}x^2\right)\right]. \quad (7.18)$$

Aplica-se o operador bosônico  $A_1^+$  em  $\psi_0^{(2)}$  e se obtém a função de onda do primeiro estado excitado  $\psi_1^{(1)}$ . Como a equação (7.16) não tem solução exata tem que usar o método variacional para encontrar o parâmetro variacional  $c_1$ , pois  $a_1$  e  $b_1$  foram fixados, do superpotencial  $W_2(x)$  sugerido e também para encontrar o valor da energia  $E_1^{(1)}$ .

Continuando a hierarquia de hamiltonianos, o companheiro supersimétrico de  $H_{2,+}$  é obtido invertendo seus operadores bosônicos:

$$H_{2,-} = A_2^- A_2^+, \quad (7.19)$$

Ou pode escrevê-lo em termos de novos operadores:

$$H_{3,+} = H_{2,-} - E_0^{(3)} = A_3^+ A_3^-, \quad (7.20)$$

sendo que os operadores bosônicos são escritos em termos do novo superpotencial  $W_3(x)$  sugerido:

$$A_3^+ = -\frac{d}{dx} + W_3(x) \text{ e } A_3^- = \frac{d}{dx} + W_3(x). \quad (7.21)$$

substituindo estes operadores bosônicos na equação (7.20) e igualando à equação (7.19), tem-se a nova equação de Riccati:

$$-\frac{a^2}{dx^2} + W_2^2(x) + W_2'(x) + E_0^{(2)} = -\frac{a^2}{dx^2} + W_3^2(x) - W_3'(x) + E_0^{(3)}, \quad (7.22)$$

substituindo o superpotencial já encontrado, a equação acima pode ser reescrita:

$$(a_1x^5 + b_1x^3 + c_1x)^2 + (a_1x^5 + b_1x^3 + c_1x)' + E_0^{(2)} = W_3^2(x) - W_3'(x) + E_0^{(3)}. \quad (7.23)$$

Neste caso, não se pode achar a solução para a equação (7.23) e sugere o superpotencial com a forma:

$$W_3(x) = a_2x^5 + b_2x^3 + c_2x, \quad (7.24)$$

o superpotencial gera a função de onda:

$$\psi_0^{(3)} \propto \exp[-\int W_3(x)dx] \propto \exp\left[-\left(\frac{a_2}{6}x^6 + \frac{b_2}{4}x^4 + \frac{c_2}{2}x^2\right)\right]. \quad (7.25)$$

Pode-se fazer uso de um software para encontrar os autovalores e o parâmetro variacional ( $c_n$ ), já que os parâmetros  $a_n$  e  $b_n$  são fixos.

E assim tem  $E_2^{(1)}$ ,  $c_2$ , continuando a hierarquia de hamiltonianos, fazendo o mesmo que anteriormente, o companheiro supersimétrico de  $H_{3,+}$  é obtido invertendo os operadores bosônicos gerando  $H_{3,-}$  ou pode escrevê-lo em termos de novos operadores, gerando  $H_{4,+}$ . Assim, encontrou-se uma nova equação de Riccati para a qual é proposto um novo superpotencial  $W_4(x)$ . Para encontrar os parâmetros variacionais e as energias subsequentes foi lançado mão do método variacional. Os valores encontrados para os parâmetros e as energias para cada estado são apresentados na tabela (7.1).

Tabela 7.1: Valores dos parâmetros  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $c_n$  e autovalores de energia obtidos através do formalismo supersimétrico e Método Variacional.

n	Energia ( $E_n$ )	$a_n$	$b_n$	$c_n$
1	4,0371	0,03	-0,56	2,44
2	8,1891	0,03	-0,56	2,35
3	12,0892	0,03	-0,56	2,33
4	15,962	0,03	-0,56	2,33
5	19,8323	0,03	-0,56	2,33

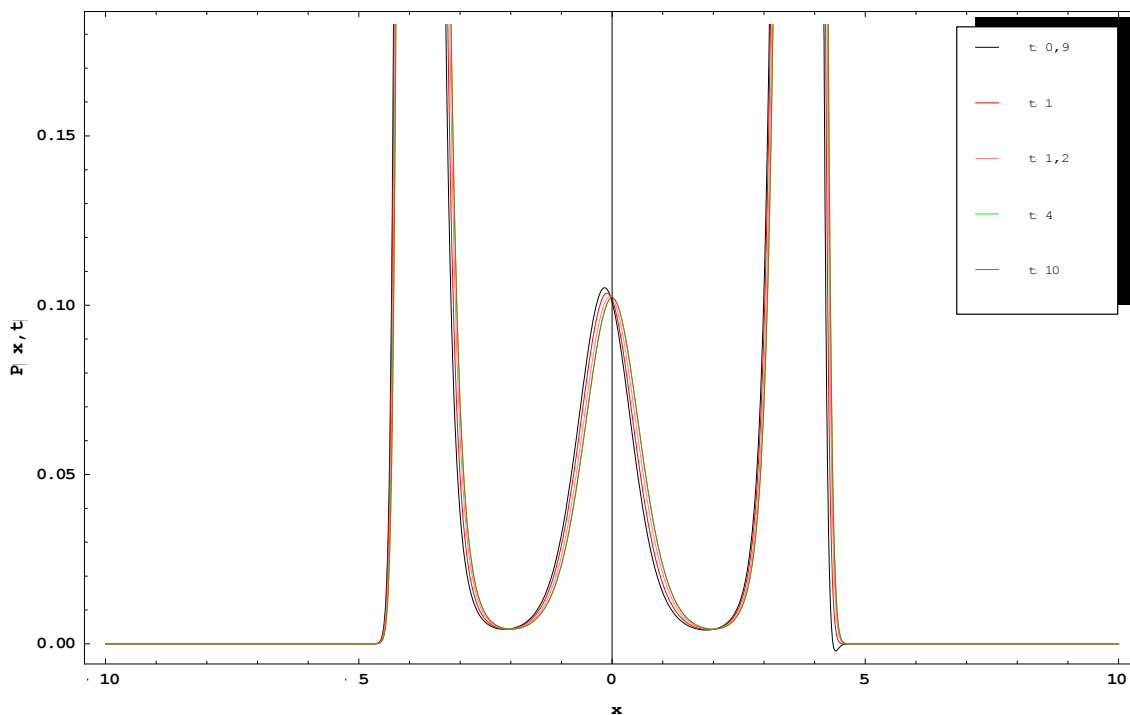
Fonte: Elaborada pela autora.

As funções de onda e energias encontradas anteriormente foram substituídas na equação de Fokker-Planck para obter a distribuição de probabilidade  $P(x,t)$ :

$$P(x,t) = \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(x_0)} \sum_{n=0}^{\infty} [\psi_n(x_0)\psi_n(x)] e^{-t|\lambda_n|}, \quad (7.28)$$

O gráfico mostrado na figura (7.2) expressa  $P(x,t)$  encontrado para este problema, o truncamento da série ocorreu para  $n=5$ , pois não se notou diferença na curva de distribuição de probabilidades para mais termos da série. No gráfico de  $P(x,t)$  é apresentado o resultado para os cinco primeiros termos da série, para cinco tempos diferentes.

Figura 7.2: Representação da distribuição de probabilidade  $P(x,t)$  versus  $x$  para o potencial polinomial de ordem seis para alguns tempos fixos em unidades de tempo.



Fonte: Elaborada pela autora.

Analisando a figura (7.2), pode-se inferir que a curva de distribuição de probabilidade se apresenta concentrada na região do primeiro mínimo do potencial para pequenos valores de tempo. Isso ocorre como consequência direta da condição inicial utilizada  $P(x,t=0) = \delta(x - x_0)$ , para  $x_0 = -3,9$ , passando-se o tempo, mesmo com variação pequena a curva que representa a distribuição de probabilidade torna-se dividida entre os dois mínimos da distribuição e para valores de tempo maiores que 10, as curvas da distribuição de probabilidade apresentadas coincidem chegando no estado estacionário.



## CAPÍTULO 8

### RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos para os tempos característicos obtidos da equação de Fokker-Planck através da solução da equação tipo Schrödinger para os potenciais polinomiais de ordem 4 e de ordem 6. Neste sentido, as integrais da distribuição de probabilidade para encontrar as probabilidades totais em função do tempo do lado esquerdo  $N_1$  e do lado direito  $N_2$  foram calculadas. Desta forma, é possível observar a evolução temporal do sistema:

$$N_1(t) = \int_{-10}^0 P(x, t) dx \quad (8.1)$$

e

$$N_2(t) = \int_0^{10} P(x, t) dx \quad (8.2)$$

O tempo característico  $t_c$  do sistema para que este alcance o equilíbrio, é dado quando metade do sistema está antes da barreira de energia e a outra metade está depois da barreira central de energia, este é o tempo necessário para o sistema atingir o estado de equilíbrio. Espera-se uma distribuição final com essas características pois os sistemas são descritos por potenciais biestáveis simétricos, onde no estado estacionário a curva da distribuição de probabilidade  $P(x, t)$  está igualmente distribuída entre os mínimos mais profundos do potencial. Com o estudo do tempo característico  $t_c$ , pode-se observar a evolução temporal dos sistemas para diferentes valores da condição inicial  $x_0$ . Agora, pode-se calcular os resultados para os potenciais indicados a seguir, cujas probabilidades foram encontradas no capítulo anterior.

#### Potencial Biestável Simétrico

A primeira energia livre encontrada corresponde a:

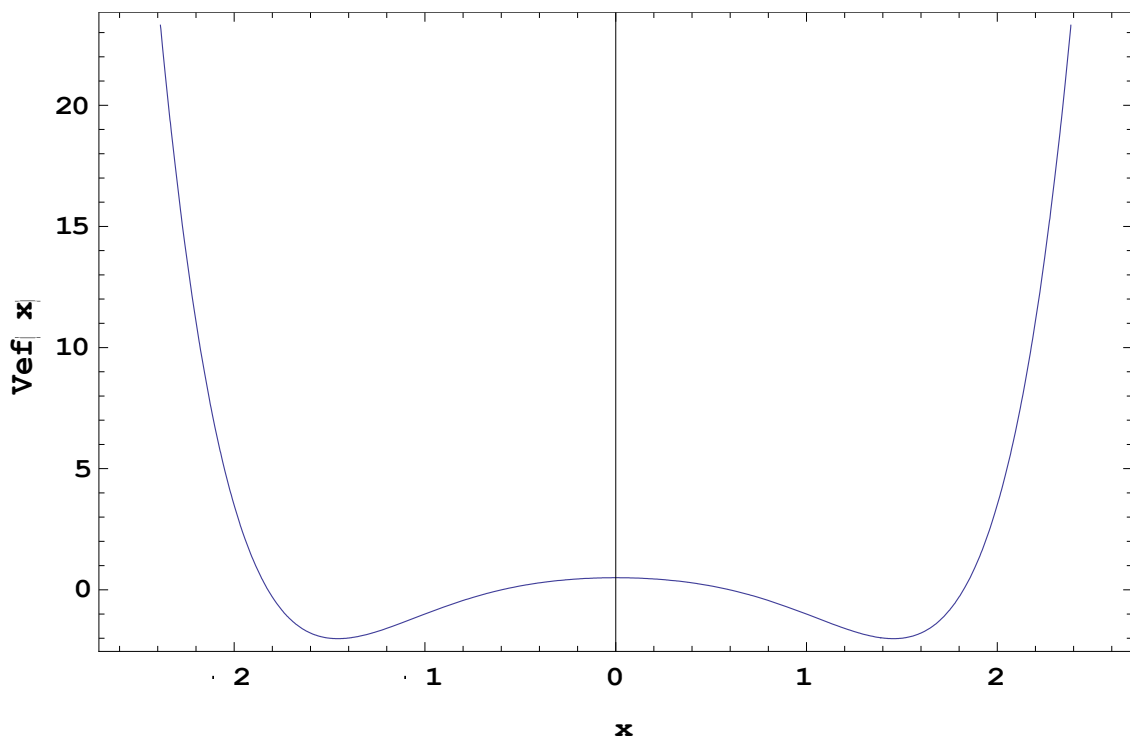
$$f(x) = a x^4 + c x^2, \quad (8.3)$$

e o potencial efetivo do problema é dado por:

$$\frac{V_{ef}(x)}{D} = \beta^2 \left\{ 4a^2 x^6 + 4acx^4 + \left( c^2 - \frac{6a}{\beta} \right) x^2 - \frac{c}{\beta} \right\}. \quad (8.4)$$

Representando o potencial acima graficamente tem a curva mostrada na figura (8.1):

Figura 8.1: Representação do potencial efetivo do potencial biestável simétrico.

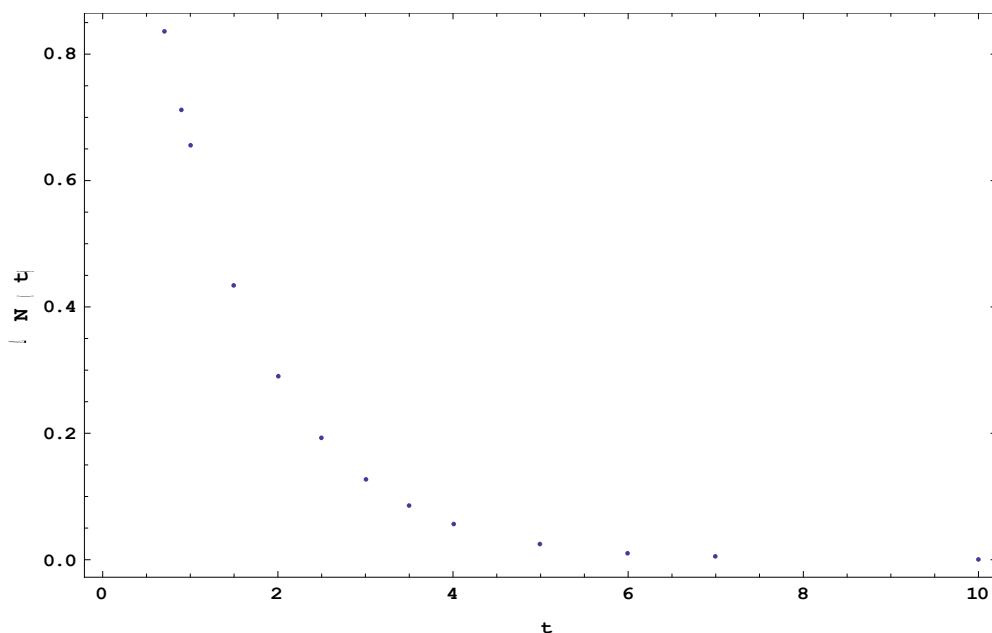


Fonte: Elaborada pela autora.

O gráfico mostrado na figura (8.1) representa o potencial efetivo, que é o potencial usado na equação tipo Schrödinger. Neste caso, a forma do potencial efetivo é bem parecida com a forma da energia livre, representada na figura 8.1.

Para melhor compreensão do problema, pode-se obter o gráfico da população total na região de cada mínimo em função do tempo fazendo a integral das probabilidades totais, como descrito nas equações (8.1) e (8.2). Observa-se a evolução temporal das probabilidades totais e o comportamento do sistema desde o início, no qual toda a população está concentrada no ponto  $x_0$  até o estado estacionário, em que as probabilidades são iguais nos dois mínimos do potencial. Na figura (8.2) é representado o gráfico de  $\Delta N(t)$  em função do tempo.

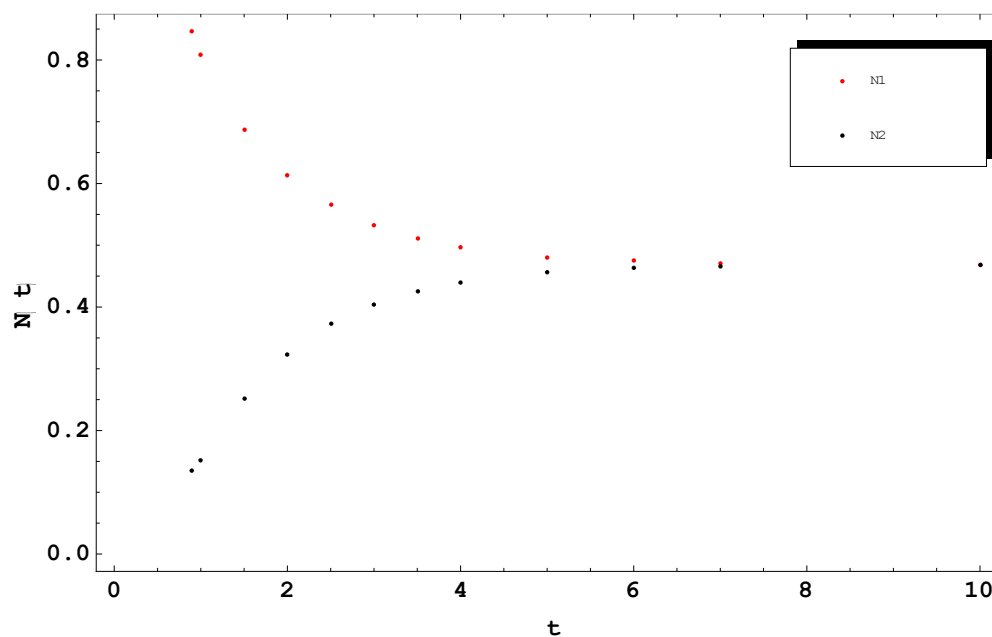
Figura 8.2: Figura que representa a população  $\Delta N(t)$  versus o tempo do potencial biestável simétrico.



Fonte: elaborada pela autora.

Pode-se também obter as curvas das probabilidades totais em função do tempo,  $N_1$  e  $N_2$  individualmente, como mostrado na figura (8.3):

Figura 8.3: Figura que representa as probabilidades  $N_1(t)$  e  $N_2(t)$  versus o tempo do potencial biestável simétrico.



Fonte: Elaborada pela autora.

Uma maneira de se obter um tempo característico do sistema é ajustar exponencialmente a curva da Figura 8.2,  $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t) \equiv A \exp\left[-\frac{t}{\tau_c}\right]$ . Porém, como há problemas relacionados ao truncamento da série para tempos menores que 0,7 u.t. (sendo u.t. unidade de tempo), o ajuste da Figura 8.2 para uma exponencial foi realizado a partir desse valor de tempo e obteve o valor de 1,23 u.t..

### Potencial Polinomial de Ordem 6

Considerando a energia livre como sendo dada por:

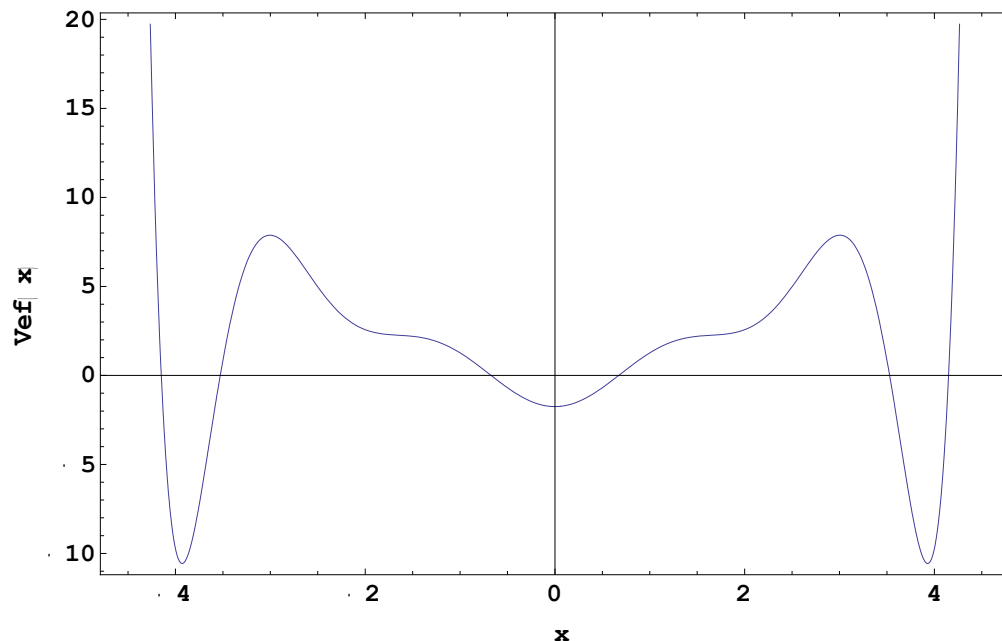
$$f(x) = a x^6 + b x^4 + c x^2, \quad (8.5)$$

e o potencial efetivo do problema é escrito como:

$$\frac{V_{ef}(x)}{D} = \frac{1}{2} \{-2c - 12bx^2 - 30ax^4 + \frac{1}{2}(-2cx - 4bx^3 - 6ax^5)^2\}. \quad (8.6)$$

Esse potencial é representado na figura (8.4) para  $a=0,01$ ,  $b=-0,28$ ,  $c=1,75$ .

Figura 8.4: Representação do potencial efetivo polinomial de ordem 6 versus  $x$ .

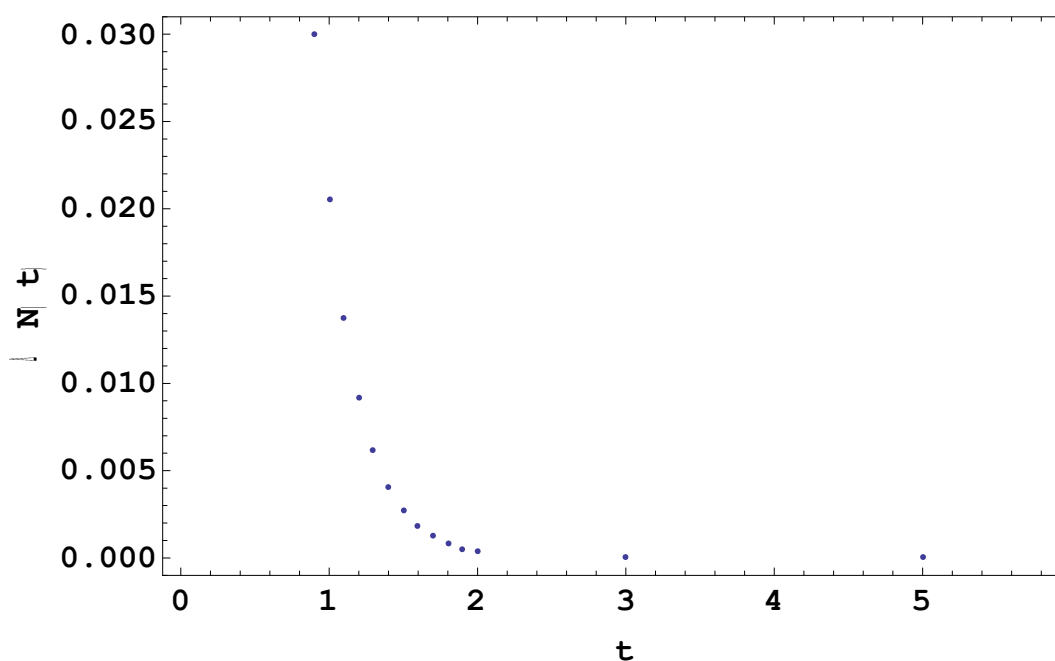


Fonte: Elaborada pela autora.

Como anteriormente, para melhor compreender o problema, foi construído o gráfico da população total na região de cada mínimo em função do tempo fazendo a integral

das probabilidades totais, como descrito nas equações (8.1) e (8.2). Nota-se o comportamento do sistema desde o início e a evolução temporal das probabilidades totais, onde toda a população está concentrada no ponto  $x_0$  até o estado estacionário, as probabilidades são iguais nos dois mínimos do potencial. Tem-se na figura (8.5) a representação gráfica de  $\Delta N(t)$  em função do tempo:

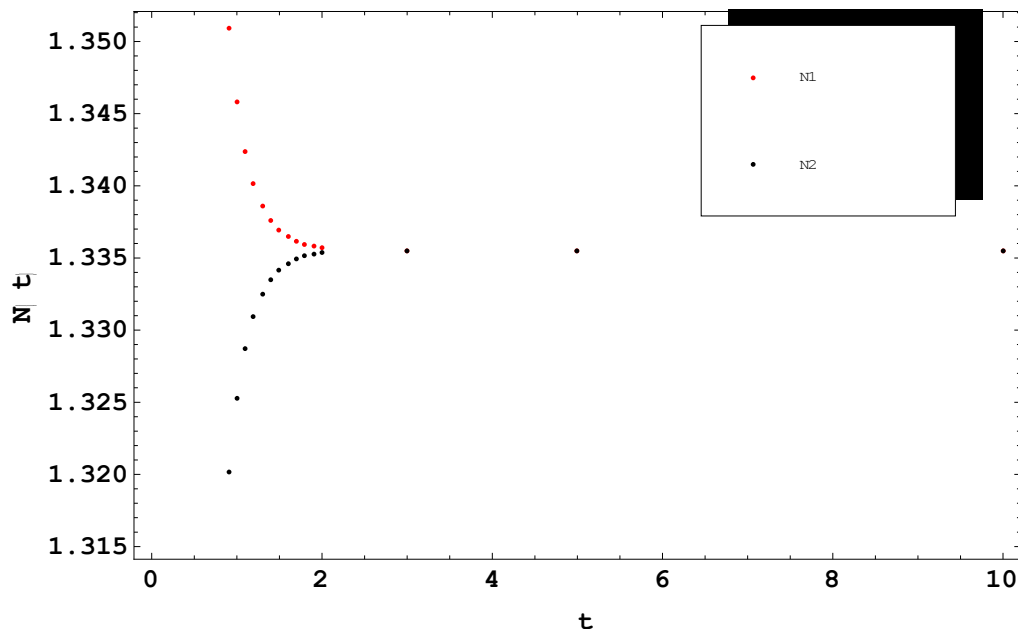
Figura 8.5: Figura que representa a população  $\Delta N(t)$  versus o tempo para o potencial polinomial de ordem 6.



Fonte: Elaborada pela autora.

Pode-se também obter as curvas das probabilidades totais em função do tempo,  $N_1$  e  $N_2$  individualmente, figura (8.6):

Figura 8.6: Figura que representa as probabilidades  $N_1(t)$  e  $N_2(t)$  versus o tempo do potencial polinomial de ordem 6.



Fonte: Elaborada pela autora.

Uma maneira de se obter um tempo característico do sistema é ajustar exponencialmente a curva da figura 8.5,  $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t) \equiv A \exp\left[-\frac{t}{\tau_c}\right]$ .

Porém, há dificuldades para valores de tempos pequenos, este ajuste da figura 8.6 para uma exponencial acaba sendo feito apenas para  $t > 0,9$  u.t.. e se obteve o valor de 0,24 u.t..

## Análise dos Resultados

Para analisar a distribuição da probabilidade do sistema através da evolução temporal, considera-se a condição inicial ( $x_0$ ) em um ponto negativo, ou seja, o sistema se encontra inicialmente do lado esquerdo da barreira central do potencial. Pelas figuras 8.1 e 8.5, pode-se observar o processo de transição entre os mínimos do potencial para os casos estudados. Para tempos pequenos, a distribuição de probabilidade se aproxima da função delta de Dirac, cuja expansão é uma série infinita. Como a série  $P(x,t)$  necessita de truncamento, isto acaba gerando erros numéricos, e assim, os resultados obtidos indicam que para tempos muito pequenos há necessidade de um número maior de termos na série. Neste sentido, fixa-se o número de termos na expansão e o valor do tempo foi diminuído até que os resultados ficassem inconsistentes, por exemplo, com o aparecimento de valores negativos para a probabilidade. Cada sistema tem seu tempo mínimo, por exemplo, nas Figuras 6.2

e 7.2 estão representadas as curvas da distribuição começando com um tempo mínimo, que foi  $t=0,7$  e  $t=0,9$ , respectivamente, para os sistemas. No estado estacionário dessas figuras, a população se encontra concentrada na região dos mínimos de potencial.

Em estudos como da referência [2], os resultados revelaram que o tamanho da barreira de energia influencia no tempo mínimo e no tempo do estado estacionário. Quanto menor o tamanho da barreira de energia, os tempos de transições também são menores. O tempo de transição relaciona o tempo que o sistema leva para atravessar a barreira de energia central até que a probabilidade se distribui igualmente entre os dois mínimos de maior profundidade, ou seja, atinge o estado estacionário.

Neste caso, para o sistema representado pelo potencial polinomial de ordem 4, o  $t_c=1,23$  u.t. e para o sistema representado pelo potencial polinomial de ordem 6 o  $t_c=0,24$  u.t..

## CAPÍTULO 9

### CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Como inicialmente proposto, pode-se resolver alguns problemas descritos por potenciais polinomiais usando supersimetria, através do método de hierarquia de hamiltonianos. Assim, pode-se obter as funções de onda e energia para cada nível construído, mesmo que de forma aproximada, pois ambos os potenciais são ditos potenciais parcialmente solúveis, ou seja, não é possível encontrar todos seus autoestados e autoenergias de forma analítica e se faz necessário usar métodos aproximativos, no caso foi usado o método variacional. Com estas grandezas, pode-se encontrar a distribuição de probabilidade do problema  $P(x,t)$  que delas depende, e obter assim a solução para a equação de Fokker-Planck que pode ser reescrita como uma equação tipo Schrödinger.

Mesmo que esses problemas sejam clássicos, foi possível mapear a equação de Fokker-Planck em uma equação tipo Schrödinger. Pode-se, então, observar que o método de solução pode ser estendido de um potencial (energia livre) com dois mínimos para um potencial com três mínimos.

Encontrada a distribuição de probabilidade dos sistemas, calculou-se o tempo de passagem ( $t_c$ ) entre os mínimos dos potenciais propostos.

Uma possível aplicação para essas funções de potencial é relacionar o potencial biestável simétrico (de grau 4) com o processo de enovelamento de uma proteína que não tem estado intermediário e o potencial de grau seis, representaria este processo com um estado intermediário. Assim, pode-se comparar o tempo de passagem de ambos os sistemas através das barreiras e indicar o quanto este estado intermediário pode interferir ou não no tempo, e para isso é preciso fazer os devidos ajustes na forma do potencial, para que ambos tenham o mesmo tamanho, e outros ajustes que sejam necessários para esta comparação como sugerido no artigo da referência [14].



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Risken H., The Fokker–Planck Equation, Springer, New York, 1989.
- [2] Caldas, D. Solução da Equação de Fokker-Planck para o Potencial do Oscilador Harmônico Duplo. Dissertação (Mestrado em Biofísica Molecular) – Ibilce, Unesp, 2012.
- [3] Polotto, F. Supersymmetric quantum mechanics method for the Fokker-Planck equation with applications to protein folding dynamics. *Journal of Physics A-Mathematical and Theoretical*, v. 1, p. 286-300, 2018.
- [4] Araujo, M. T., Drigo Filho, E., A general solution of the Fokker-Planck equation, *Journal of Statistical Physics*, 146 (2012) 610.
- [5] Batael H. O. et al. Operadores-escada generalizados para sistemas quânticos, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 40, nº 2, e2305 (2018).
- [6] Drigo Filho, E., *Supersimetria aplicada a Mecânica Quântica*, São Paulo, ed. Unesp (2009).
- [7] Witten E., *Nucl. Phys. B*188 (1981) 513.
- [8] Eisberg R. e Resnick R., *Física Quântica*, Editora Campus, Rio de Janeiro (1979).
- [9] Griffiths D. J. “*Mecânica Quântica*” Ed. Pearson Prentice Hall, São Paulo, SP, 2011.
- [10] Tomé, T., Oliveira, M. J., *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, São Paulo, Edusp(2001).
- [11] Zill, D. G.; Cullen, M. R. *Equações Diferenciais*. São Paulo: Pearson Makron Books, 2001. Vol. 1.
- [12] Giordano, N. J., *Computational Physics*, New Jersey, Prentice-Hall, Inc. (1997).
- [13] Polotto, F. *Equação de Fokker-Planck e Enovelamento de Proteínas*. Tese (Doutorado em Biofísica Molecular) –Ibilce, Unesp, 2015.
- [14] Wagner C. AND Kiefhaber T. Intermediates can accelerate protein folding. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* Vol. 96, pp. 6716–6721, June 1999.