



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”

Campus de São José do Rio Preto

Denise Caldas Campos

Solução da Equação de Fokker-Planck para o Potencial do  
Oscilador Harmônico Duplo

São José do Rio Preto

2012

Denise Caldas Campos

Solução da Equação de Fokker-Planck para o Potencial do  
Oscilador Harmônico Duplo

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, junto ao programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

Co-orientador: Prof. Dr. Jorge Chahine

São José do Rio Preto

2012

Denise Caldas Campos

Solução da Equação de Fokker-Planck para o Potencial do  
Oscilador Harmônico Duplo

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, junto ao programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Mário José de Oliveira  
USP - São Paulo

Prof. Dra. Regina Maria Ricotta  
FATEC - São Paulo

São José do Rio Preto, 17 de agosto de 2012

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Deus da minha vida por mais uma etapa concluída.

Aos meus pais, Moacir e Elienai, que sempre me ensinaram a plantar sementes boas e que me renderam bons frutos. Nos momentos difíceis estavam sempre me apoiando, não existe alicerce melhor do que uma família abençoada por Deus.

À minha irmã e amiga, Lilian Kelly Caldas Viudes, pelo carinho, compreensão e pelas horas dedicadas a este trabalho, na leitura e correções ortográficas.

Ao meu marido, Homero Pereira Campos Júnior, pelo amor, companheirismo e apoio.

Ao professor Elso Drigo Filho que com toda a sua experiência, sabedoria e dedicação me orientou neste trabalho.

Ao meu co-orientador Jorge Chahine pelas importantes sugestões e discussões.

Aos professores do Departamento de Física do Ibilce que também são responsáveis por esta conquista.

Aos colegas do grupo que me acompanharam e me ajudaram desde o início.

A todas as pessoas que estiveram ao meu lado ao longo de toda a caminhada em busca de meus objetivos.

A CAPES pelo importante apoio financeiro.

“O tempo é relativo e não pode ser medido exatamente do mesmo modo e por toda parte” (Albert Einstein)

## Resumo

A equação de Fokker-Planck é utilizada para descrever processos estocásticos e possui aplicações em muitos ramos da física, química e biologia. Para obter a solução da equação de Fokker-Planck, podemos mapeá-la em uma equação tipo Schrödinger através de mudanças apropriadas nas funções envolvidas. A vantagem dessa associação é que se pode construir a distribuição de probabilidade da equação de Fokker-Planck usando soluções conhecidas da equação de Schrödinger. Neste trabalho, fazendo uso dessa associação, apresentamos a solução da equação de Fokker-Planck para um potencial biestável relacionado ao oscilador harmônico duplo. As funções de onda e os autovalores encontrados através da equação tipo Schrödinger permitem construir a distribuição de probabilidade como uma série de funções. Desse modo, podemos observar a evolução temporal do sistema descrevendo suas propriedades dinâmicas.

## **Abstract**

*The Fokker-Planck equation is used in describing stochastic processes and can be applied in many branches of physics, chemistry and biology. The solution of the Fokker-Planck equation can be obtained by mapping it in a Schrödinger type equation via appropriate changes in the functions involved. The advantage of this combination is that one can construct the probability distribution the Fokker-Planck equation by using well-known solutions of the Schrödinger equation. In this work, making use of such a combination, we present the solution of the Fokker-Planck equation for a bistable potential related to the double-harmonic oscillator. The wave functions and autovalues found by solving the Schrödinger type equation allows the construction of the probability distribution as a series of functions. Thus, we can observe the temporal evolution of the system describing their dynamic properties.*

## Lista de Figuras

Figura 2.1: Representação gráfica de $V(x)$ para o oscilador harmônico duplo, as posições de equilíbrio encontram-se em $\alpha$ e $-\alpha$ .....	27
Figura 2.2: $\nu$ versus $\sqrt{2}\alpha$ para os quatro primeiros níveis de energia do oscilador harmônico duplo.....	30
Figura 2.3: Gráfico do potencial (2.2) com $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$ , $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$ , $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$ e $m = \omega = 1$ ....	32
Figura 4.1: Potencial (4.4) em função da coordenada $x$ para $\alpha = 2/\sqrt{2}$ .....	39
Figura 4.2: Resultados obtidos no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) utilizando dez termos da série e com os seguintes parâmetros: $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$ e $x_0 = -2$ . As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a distribuição de probabilidade para quatro valores diferentes de tempo e em (e) todas as curvas são agrupadas evidenciando a evolução temporal do sistema.....	41
Figura 4.3: No gráfico (a) estão apresentadas as curvas das probabilidades totais em função do tempo para $N_1(t)$ (4.2) e $N_2(t)$ (4.3) e em (b) esta a curva de $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$ em função do tempo.....	43
Figura 4.4: Relação entre os tempos $t_c$ , que define o estado estacionário do sistema, e as condições iniciais $x_0$ variando de $-0,1$ a $-2,8$ .....	44
Figura 4.5: Relação entre o tempo característico $\tau$ e a condição inicial do sistema $x_0$ .....	45
Figura 4.6: Potencial (4.6) em função da coordenada $x$ para $\alpha = 4/\sqrt{2}$ .....	46
Figura 4.7: Resultados obtidos no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) utilizando dez termos da série e com os seguintes parâmetros: $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$ e $x_0 = -2$ . As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a distribuição de probabilidade para quatro valores diferentes de tempo e em (e) todas as curvas são agrupadas, o que evidencia a evolução temporal do sistema.....	48
Figura 4.8: No gráfico (a) estão apresentadas as curvas das probabilidades totais em função do tempo para $N_1(t)$ (4.2) e $N_2(t)$ (4.3) e em (b) esta a curva de $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$ em função do tempo.....	50



Figura 4.9: Relação entre os tempos $t_c$ , que define o estado estacionário do sistema, e as condições iniciais $x_0$ variando de $-0,1$ a $-4,5$ .....	52
Figura 4.10: Relação entre o tempo característico $\tau$ e a condição inicial do sistema $x_0$ .....	53
Figura 4.11: Potencial (4.8) em função da coordenada $x$ para $\alpha = 6/\sqrt{2}$ .....	54
Figura 4.12: Resultados obtidos no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) utilizando dez termos da série e com os seguintes parâmetros: $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$ e $x_0 = -2$ . As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a distribuição de probabilidade para quatro valores diferentes de tempo e em (e) todas as curvas são agrupadas evidenciando a evolução temporal do sistema.....	56
Figura 4.13: No gráfico (a), estão apresentadas as curvas das probabilidades totais em função do tempo para $N_1(t)$ (4.2) e $N_2(t)$ (4.3) e em (b) esta a curva de $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$ em função do tempo.....	58
Figura 4.14: Relação entre os tempos $t_c$ , que define o estado estacionário do sistema e as condições iniciais $x_0$ variando de $-0,1$ a $-6,8$ .....	59
Figura 4.15: Relação entre o tempo característico $\tau$ e a condição inicial do sistema $x_0$ .....	60
Figura A.1: Comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário, Figura 4.2 (d) e a soma das gaussianas (A.1) e (A.2) para $\alpha = 2/\sqrt{2}$ .....	67
Figura A.2: Comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário, Figura 4.7 (d), e a soma das gaussianas (A.1) e (A.2) para $\alpha = 4/\sqrt{2}$ .....	68
Figura A.3: Comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário, Figura 4.12 (d) e a soma das gaussianas (A.1) e (A.2) para $\alpha = 6/\sqrt{2}$ .....	69

## Lista de Tabelas

Tabela 2.1: Resultados dos valores de $\nu$ obtidos das equações transcendentais (2.10) e (2.11) considerando $\sqrt{2}\alpha = 2$ , $\sqrt{2}\alpha = 4$ e $\sqrt{2}\alpha = 6$ .....	31
Tabela 4.1: Resultados dos autovalores de energia, $\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon)$ , para o oscilador harmônico duplo com $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$ .....	40
Tabela 4.2: Resultados dos autovalores de energia, $\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon)$ , para o oscilador harmônico duplo com $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$ .....	47
Tabela 4.3: Resultados dos autovalores de energia, $\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon)$ , para o oscilador harmônico duplo com $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$ .....	55
Tabela 4.4: Valores do tempo mínimo e do tempo do estado estacionário para os três casos estudado.....	61

## SUMÁRIO

<b>Introdução</b>	13
<b>Capítulo 1 – EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK</b>	15
1.1. Obtenção da equação de Fokker-Planck	15
1.2. Solução estacionária	18
1.3. Equação de Fokker-Planck associada à equação de Schrödinger	21
<b>Capítulo 2 – EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER</b>	26
2.1. Oscilador harmônico duplo	26
2.2. Solução analítica	27
<b>Capítulo 3 – A EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA UM POTENCIAL BIESTÁVEL SIMÉTRICO</b>	33
3.1. Equação de Fokker-Planck associada à equação de Schrödinger para o potencial do oscilador harmônico duplo	33
<b>Capítulo 4 – RESULTADOS NUMÉRICOS</b>	37
4.1. Primeiro caso: $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$	38
4.2. Segundo caso: $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$	46
4.3. Terceiro caso: $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$	53
4.4. Análise dos resultados	60
<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	63
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	64
<b>APÊNDICE A</b>	66
A.1. Análise do primeiro caso: $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$	66
A.2. Análise do segundo caso: $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$	67

A.3. Análise do terceiro caso:  $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$

## INTRODUÇÃO

A teoria do movimento Browniano (REIF, 1985), que descreve o movimento aleatório de uma partícula imersa em um fluido, trata a dinâmica de sistemas fora do equilíbrio. A descrição desse tipo de sistema pode ser feita através da equação de Fokker-Planck (RISKEN, 1989), a qual possui uma vasta aplicação em diversos campos das ciências exatas e biológicas. Em particular, essa equação é usada para tratar processos que envolvem difusão, transferência de elétrons e enovelamento de proteína (BRYNGELSON & WOLYNES, 1989).

A equação de Fokker-Planck fornece a evolução temporal da distribuição de probabilidade do sistema de interesse. Devido à dificuldade de solucionar essa equação, podemos mapeá-la em uma equação tipo Schrödinger (RISKEN, 1989; TOMÉ & OLIVEIRA, 2001). A associação da equação de Fokker-Planck com a equação de Schrödinger tem sido bastante útil não somente para potenciais com solução analítica, mas também para potenciais mais complicados, pela possibilidade do uso dos métodos de soluções aproximativos, por exemplo, o uso do formalismo de supersimetria (DRIGO FILHO, 2009), o método variacional (DRIGO FILHO & RICOTTA, 2000; BORGES, DRIGO FILHO & RICOTTA, 2010), entre outros.

Neste trabalho, fazendo uso desta associação, será apresentada a solução da equação de Fokker-Planck para um potencial biestável relacionado ao oscilador harmônico duplo (MERZBACHER, 1970; VARADA & AGARWAL, 1993) com diferentes tamanhos da barreira de energia. As funções de onda e os autovalores de energia encontrados através da equação tipo Schrödinger permitem construir a evolução temporal do sistema e o processo de transição entre os dois mínimos do potencial. No equilíbrio, o estado estacionário mostra que as probabilidades de encontrar o sistema próximo a cada mínimo dos poços são iguais.

Através da distribuição de probabilidade calculamos algumas quantidades dinâmicas do sistema, por exemplo, a probabilidade total em função do tempo e o tempo característico para diferentes condições iniciais adotadas.

No estudo de vários sistemas, o potencial biestável tem sido usado para simular as interações a que esse sistema está sujeito, um exemplo é a análise da molécula de amônia ( $\text{NH}_3$ ) em um sistema denso (MERZBACHER, 1970).

Este trabalho está redigido da seguinte forma: no primeiro capítulo é realizada uma revisão apresentando a dedução da equação de Fokker-Planck a partir da equação de Langevin, em seguida são obtidas as soluções estacionária e temporal da equação de Fokker-Planck; no segundo capítulo, é reproduzida a solução analítica da equação de Schrödinger para um potencial harmônico duplo (MERZBACHER, 1970); no terceiro, após estabelecer a relação entre as equações de Schrödinger e Fokker-Planck (seção 1.3 do capítulo 1), é apresentada a solução da equação de Fokker-Planck para o potencial biestável harmônico duplo; as soluções numéricas e discussões são feitas no quarto capítulo. Por fim, no quinto capítulo têm-se as considerações finais do trabalho.

## CAPÍTULO 1

### EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK

Neste capítulo, primeiramente, é apresentada a dedução da equação de evolução temporal da distribuição de probabilidade  $P(x, t)$ , também denominada equação de Fokker-Planck (RISKEN, 1989), que é obtida a partir da equação de Langevin, a qual pode ser usada também para representar matematicamente o movimento Browniano (REIF, 1985). De acordo com este movimento, observado por Robert Brown, em 1828, uma partícula macroscópica de massa  $m$ , imersa em um fluido, descreve o movimento aleatório devido a colisões desta com as moléculas que formam o meio, de modo que não é possível saber a posição exata da partícula. No entanto, através da equação de Fokker-Planck é possível obter a distribuição de probabilidade de encontrar a partícula no fluido.

Em seguida, é determinada a solução da equação de Fokker-Planck para o caso estacionário (TOMÉ & OLIVEIRA, 2001), na qual a distribuição de probabilidade é independente do tempo. E por fim, é obtida a associação da equação de Fokker-Planck com a equação de Schrödinger (RISKEN, 1989; TOMÉ & OLIVEIRA, 2001), por meio de mudanças apropriadas nas funções envolvidas.

Devido à relação entre a equação de Fokker-Planck e a equação de Schrödinger, sistemas estudados na mecânica quântica fornecem subsídios para a análise de processos estocásticos. A vantagem desta associação é que se pode obter solução da equação de Fokker-Planck por meio de métodos de solução da equação de Schrödinger.

#### 1.1. Obtenção da equação de Fokker-Planck

A equação de Langevin é dada por (TOMÉ & OLIVEIRA, 2001):

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t), \quad (1.1)$$

sendo a variável  $x$  uma coordenada generalizada, que pode ser identificada como posição ou velocidade, e a função  $f(x)$  é uma força, ainda que esse termo só possa ser usado se a variável  $x$  representar a velocidade. A função  $\zeta(t)$  representa a influência estocástica, também conhecida como ruído, que possui as seguintes propriedades:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad (1.2)$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (1.3)$$

isto é, as variáveis  $\zeta(t)$  e  $\zeta(t')$  são independentes para  $t \neq t'$  e, em média, nulas.

Considere  $P(x, t)$  a distribuição de probabilidade e  $W(x, t + \Delta t|x', t)$  a probabilidade de transição entre os estados (RISKEN, 1989), tal que

$$P(x, t + \Delta t) = \int W(x, t + \Delta t|x', t) P(x', t) dx'. \quad (1.4)$$

A equação de Fokker-Planck é obtida considerando transições entre estados próximos, isto é  $\Delta x = x - x' \rightarrow 0$ . Assim, expandindo-se o produto  $W(x, t + \Delta t|x', t) P(x', t)$  em série de Taylor e considerando-se termos até a segunda ordem têm-se,

$$\begin{aligned} W(x, t + \Delta t|x', t)P(x', t) = & W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)P(x, t) - \Delta x \left[ \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} W(x + \right. & (1.5) \\ & \left. \Delta x, t + \Delta t|x, t) + P(x, t) \frac{\partial W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x} \right] + \frac{\Delta x^2}{2} \left[ \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t) + \right. \\ & \left. 2 \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \frac{\partial W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x} + P(x, t) \frac{\partial^2 W(x + \Delta x, t + \Delta t|x, t)}{\partial x^2} \right], \end{aligned}$$

inserindo esse resultado na equação (1.4) e integrando em  $d(\Delta x)$ , obtém-se



$$\begin{aligned}
P(x, t + \Delta t) = & P(x, t) \int W(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t) d(\Delta x) - \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \int \Delta x W(x + \\
& \Delta x, t + \Delta t | x, t) d(\Delta x) - P(x, t) \int \Delta x \frac{\partial W(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t)}{\partial x} d(\Delta x) + \\
& \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \int \Delta x^2 W(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t) d(\Delta x) + \\
\frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \int \Delta x^2 \frac{\partial W(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t)}{\partial x} d(\Delta x) + & \frac{1}{2} P(x, t) \int \Delta x^2 \frac{\partial^2 W(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t)}{\partial x^2} d(\Delta x).
\end{aligned} \tag{1.6}$$

A expressão acima se reduz a

$$\begin{aligned}
P(x, t + \Delta t) - P(x, t) = & -\langle \Delta x \rangle \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} - \left( \frac{\partial}{\partial x} \langle \Delta x \rangle \right) P(x, t) + \frac{1}{2} \langle \Delta x^2 \rangle \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} + \\
& \left( \frac{\partial}{\partial x} \langle \Delta x^2 \rangle \right) \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle \Delta x^2 \rangle \right) P(x, t).
\end{aligned} \tag{1.7}$$

A partir da equação de Langevin (1.1), juntamente com as propriedades do ruído, (1.2) e (1.3) pode-se obter  $\langle \Delta x \rangle$  e  $\langle \Delta x^2 \rangle$ , desse modo

$$\langle \Delta x \rangle = f(x) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} \langle \zeta(t') \rangle dt' = f(x) \Delta t, \tag{1.8}$$

e

$$\begin{aligned}
\langle \Delta x^2 \rangle = & [f(x)]^2 \Delta t^2 + 2f(x) \Delta t \int_t^{t+\Delta t} \langle \zeta(t') \rangle dt' + \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' d\tau \langle \zeta(t') \zeta(\tau) \rangle \\
= & [f(x)]^2 \Delta t^2 + \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \Gamma \delta(t' - \tau)
\end{aligned} \tag{1.9}$$

A alteração dos limites de integração para a função delta de Dirac para o intervalo  $[-\infty, +\infty]$  pode ser feita porque esta função está concentrada em torno de  $t' = \tau$  e decresce rapidamente para outros valores de t. Portanto,

$$\langle \Delta x^2 \rangle = [f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \int_t^{t+\Delta t} dt' = [f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t, \tag{1.10}$$

com os resultados (1.8) e (1.10), a expressão (1.7) torna-se

$$\begin{aligned}
 & P(x, t + \Delta t) - P(x, t) \\
 = & -f(x)\Delta t \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} - \left( \frac{\partial}{\partial x} f(x)\Delta t \right) P(x, t) + \frac{1}{2} ([f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t) \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} + \\
 & \left( \frac{\partial}{\partial x} ([f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t) \right) \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} ([f(x)]^2 \Delta t^2 + \Gamma \Delta t) \right) P(x, t).
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Dividindo ambos os lados dessa equação por  $\Delta t$  e considerando o limite de  $\Delta t \rightarrow 0$ , têm-se a seguinte equação diferencial

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x)P(x, t)] + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \tag{1.12}$$

que é denominada equação de Fokker-Planck. É importante ressaltar que a equação de Fokker-Planck não descreve somente propriedades estacionárias, mas também a dinâmica de sistemas dependentes do tempo.

## 1.2. Solução estacionária

A equação de Fokker-Planck (1.12) pode ser reescrita como uma equação de continuidade que expressa uma lei de conservação para a probabilidade, isto é,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t), \tag{1.13}$$

sendo  $J(x, t)$  a corrente de probabilidade definida por

$$J(x, t) = f(x)P(x, t) - \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial}{\partial x} P(x, t). \quad (1.14)$$

Integrando ambos os lados da equação (1.13) em relação à  $x$  dentro de um intervalo  $[a, b]$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b P(x, t) dx = J(a, t) - J(b, t), \quad (1.15)$$

a densidade de probabilidade deve estar normalizada para qualquer instante, ou seja, a integral do lado esquerdo da equação (1.15) deve ser uma constante igual a 1. A derivada deve ser nula e, portanto,

$$J(a, t) = J(b, t). \quad (1.16)$$

A corrente de probabilidade, assim como a densidade de probabilidade, será independente de  $t$  no regime estacionário. Deste modo, o lado esquerdo da equação (1.13) se anula, conseqüentemente a corrente de probabilidade será independente de  $x$ , ou seja, ela deve ter o mesmo valor qualquer que seja  $x$ . Considerando que, nos extremos,  $J(a, t)$  e  $J(b, t)$  são nulos, pela condição de contorno denominada refletora, a corrente de probabilidade é nula em todo o intervalo. Então,

$$f(x)P(x) - \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial}{\partial x} P(x) = 0. \quad (1.17)$$

A equação acima é uma equação diferencial de primeira ordem, cuja solução pode ser encontrada isolando-se a derivada em relação a  $x$ ,

$$\frac{1}{P(x)} \frac{d}{dx} P(x) = \frac{2}{\Gamma} f(x). \quad (1.18)$$

ou ainda,

$$\frac{d}{dx} \ln P(x) = \frac{2}{\Gamma} f(x). \quad (1.19)$$

Integrando os dois membros, obtem-se

$$\ln P(x) = \frac{2}{\Gamma} \int f(x) dx, \quad (1.20)$$

sendo que a integral de determinada força  $f(x)$  pode ser relacionada a um potencial  $V(x)$ . Assim, a equação (1.20) pode ser escrita como

$$\ln P(x) = -\frac{2}{\Gamma} V(x) + \text{constante}. \quad (1.21)$$

Então,

$$P(x) = N \exp\left[-\frac{2}{\Gamma} V(x)\right], \quad (1.22)$$

$P(x)$  é a solução da equação independente do tempo e  $N$  é a constante de normalização.

### 1.3. Equação de Fokker-Planck associada à equação de Schrödinger

A equação de Fokker-Planck (1.12) pode ser reescrita da seguinte forma,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = L_{FP}P(x, t). \quad (1.23)$$

em que  $L_{FP}$  é um operador, conhecido como operador Fokker-Planck, que age sobre funções  $\phi(x)$ , definido por

$$L_{FP} \phi(x) = -\frac{\partial}{\partial x} f(x)\phi(x) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x). \quad (1.24)$$

Supondo que  $L_{FP}$  possui um espectro discreto, isto é,

$$L_{FP}\phi_n(x) = \Lambda_n\phi_n(x), \quad (1.25)$$

sendo que  $\phi_n(x)$  são as autofunções e  $\Lambda_n$  os autovalores do operador  $L_{FP}$ .

O operador  $L_{FP}$  não é hermitiano, no entanto, é possível fazer uma transformação sobre este operador e assim obter um operador hermitiano  $L$ , como sendo

$$L\psi_n(x) = \frac{L_{FP}[\psi_0(x)\psi_n(x)]}{\psi_0(x)}. \quad (1.26)$$

As autofunções de  $L$  são  $\psi_n(x)$ , dadas por

$$\psi_n(x) = \frac{\phi_n(x)}{\psi_0(x)}. \quad (1.27)$$

Substituindo as autofunções  $\psi_n(x)$  na expressão (1.26) e usando a definição (1.25),

$$L\psi_n(x) = \frac{L_{FP}\phi_n(x)}{\psi_0(x)} = \frac{\Lambda_n\phi_n(x)}{\psi_0(x)} = \Lambda_n\psi_n(x), \quad (1.28)$$

dessa expressão, pode-se concluir que os autovalores  $\Lambda_n$  do operador  $L$  são os mesmos do operador  $L_{FP}$ .

Utilizando a definição do operador  $L_{FP}$  (1.24) em (1.26), é possível obter a forma explícita de  $L$ :

$$L\psi_n(x) = \frac{1}{\psi_0(x)} \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} [f(x)\psi_0(x)\psi_n(x)] + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\psi_0(x)\psi_n(x)] \right\}. \quad (1.29)$$

Desenvolvendo a equação acima e utilizando o conceito de corrente de probabilidade, é possível obter a seguinte expressão:

$$L\psi_n(x) = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{[f(x)]^2}{\Gamma} + \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right\} \psi_n(x) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \psi_n(x)}{\partial x^2}. \quad (1.30)$$

O operador hermitiano encontrado:  $L = -V_{ef} + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ , é semelhante ao operador hamiltoniano da equação de Schrödinger,  $H = V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ . Isso pode ser visto fazendo um ajuste de constantes  $\Gamma \propto \frac{\hbar^2}{m}$  e o termo referente ao potencial na equação de Schrödinger corresponde ao potencial efetivo, isto é,

$$V = V_{ef} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{[f(x)]^2}{\Gamma} + \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right\}. \quad (1.31)$$

Visto as semelhanças entre as equações descritas, as soluções encontradas na mecânica quântica para diferentes potenciais podem ser traduzidos para o contexto de processos estocásticos.

A distribuição de probabilidade  $P(x, t)$  pode ser escrita como produto de duas funções separadas, uma dependente da posição, dada por uma série de funções ( $P(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x)$ ) e outra dependente do tempo ( $T(t) = e^{-t|\Lambda_n|}$ ). Desta forma, obtém-se

$$P(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x) e^{-t|\Lambda_n|}. \quad (1.32)$$

Utilizando (1.27), a solução da equação de Fokker-Planck pode ser escrita em termos das autofunções do operador hermitiano, isto é,

$$P(x, t) = \psi_0(x) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x) e^{-t|\Lambda_n|}. \quad (1.33)$$

Para obter os termos  $a_n$  da somatória é preciso multiplicar ambos os lados da equação (1.33) por  $\psi_l(x)/\psi_0(x)$  e integrar em relação a  $x$ , considerando  $t = 0$ ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, 0) \frac{\psi_l(x)}{\psi_0(x)} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_0(x) \psi_n(x) \frac{\psi_l(x)}{\psi_0(x)} dx \quad (1.34)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, 0) \frac{\psi_l(x)}{\psi_0(x)} dx = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_l(x) dx \quad (1.35)$$

Pela propriedade de ortogonalidade, a integral do lado direito é igual a 1 quando  $n = l$  e igual a zero quando  $n \neq l$ , ou seja,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_l(x) dx = \delta_{n,l}. \quad (1.36)$$

Portanto,

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x, 0) \frac{\psi_n(x)}{\psi_0(x)} dx. \quad (1.37)$$

A equação de Fokker-Planck é satisfeita pela distribuição de probabilidade  $P(x, 0)$  sujeita à condição inicial

$$P(x, 0) = \delta(x - x_0).$$

Sendo assim,

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) \frac{\psi_n(x)}{\psi_0(x)} dx. \quad (1.38)$$

Obtem-se a expressão dos coeficientes  $a_n$  que são dados por (LAGE, 1995; REICHL, 1998)



$$a_n = \frac{\psi_n(x_0)}{\psi_0(x_0)}. \quad (1.39)$$

Substituindo a expressão (1.39) em (1.32) é possível obter a solução geral da equação de Fokker-Planck dependente do tempo escrita em termos da solução da equação de Schrödinger associada,

$$P(x, t) = \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(x_0)} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_0) \psi_n(x) e^{-t|\Lambda_n|}. \quad (1.40)$$

## CAPÍTULO 2

### EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

A equação de Schrödinger independente do tempo (SCHIFF, 1955; EISBERG & RESNICK, 1979) para uma partícula de massa  $m$  é escrita na seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E \psi(x). \quad (2.1)$$

O primeiro termo se refere à energia cinética ( $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ,  $h$  é a constante de Planck),  $V(x)$  corresponde ao potencial estudado e  $E$  à energia total do sistema.

A solução analítica da equação (2.1) para um potencial biestável relacionado ao oscilador harmônico duplo envolve a determinação das funções de onda (que estão associadas com a probabilidade de se encontrar o sistema em determinado estado) e dos autovalores (níveis de energia permitidos ao sistema).

#### 2.1. Oscilador Harmônico Duplo

O potencial do oscilador harmônico duplo, construído a partir de dois osciladores harmônicos simples, possui suas posições de equilíbrio em  $\alpha$  e  $-\alpha$  e é descrito por (MERZBACHER, 1970; VARADA & AGARWAL, 1993):

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 (|x| - \alpha)^2 \quad (2.2)$$

sendo  $m$  a massa e  $\omega$  é a frequência. Em  $x = 0$ , o potencial possui o valor igual a  $V(0) = \frac{1}{2}m\omega^2\alpha^2$ . O potencial (2.2) está representado na Figura 2.1.

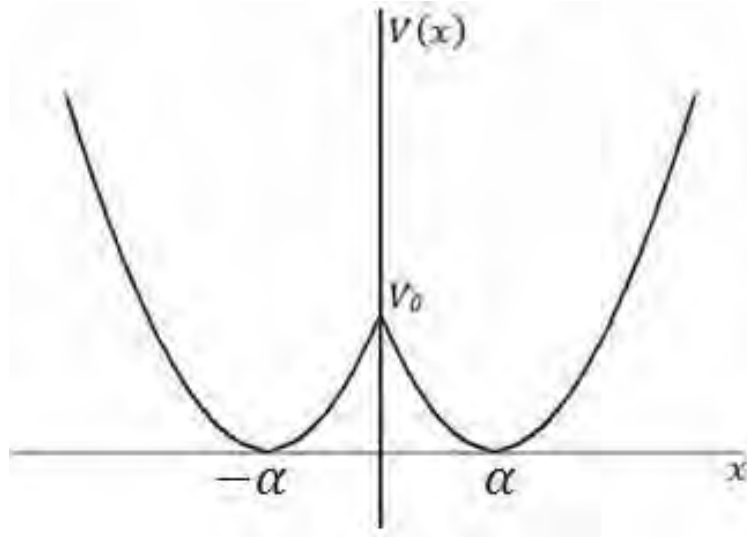


Figura 2.1: Representação gráfica de  $V(x)$  para o oscilador harmônico duplo, as posições de equilíbrio encontram-se em  $\alpha$  e  $-\alpha$ .

## 2.2. Solução Analítica

A equação de Schrödinger (2.1) para o oscilador harmônico duplo considerando, por simplicidade,  $\hbar = m = \omega = 1$  é:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} (|x| - \alpha)^2 \psi(x) = E \psi(x). \quad (2.3)$$

O parâmetro  $\alpha$  pode variar, para  $\alpha = 0$  a equação (2.3) se torna a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico simples. Neste caso, os níveis de energia são dados por (SCHIFF, 1955)

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2 \dots). \quad (2.4)$$

Para  $\alpha \neq 0$ , o problema se torna efetivamente um oscilador harmônico duplo cujos níveis de energia são

$$E = \left(\nu + \frac{1}{2}\right), \quad (2.5)$$

em que  $\nu$  é um número quântico não inteiro. A solução neste caso segue o procedimento já conhecido (MERZBACHER, 1970).

Para simplificar a resolução da equação (2.3) são introduzidas as seguintes variáveis para a coordenada positiva e negativa:

$$z_1 = (2)^{\frac{1}{2}}(x - \alpha) \quad x > 0 \quad \text{e} \quad z_2 = (2)^{\frac{1}{2}}(x + \alpha) \quad x < 0.$$

A partir da definição acima, pode-se reescrever a equação de Schrödinger para o oscilador duplo da seguinte maneira:

$$\frac{d^2\psi}{dz_1^2} + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z_1^2}{4}\right)\psi = 0 \quad (x > 0) \quad (2.6)$$

$$\frac{d^2\psi}{dz_2^2} + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z_2^2}{4}\right)\psi = 0 \quad (x < 0). \quad (2.7)$$

Uma solução particular da equação (2.6) é dada pela função parabólica cilíndrica (ABRAMOWITZ, 1968), matematicamente escrita como:

$$D_\nu(z_1) \tag{2.8}$$

$$= 2^{\nu/2} e^{-(z_1^2/4)} \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1-\nu}{2})} M\left(-\frac{\nu}{2}; \frac{1}{2}; \frac{z_1^2}{2}\right) + 2^{\nu/2} e^{-(z_1^2/4)} \frac{z_1 \Gamma(\frac{1}{2})}{\sqrt{2} \Gamma(\frac{-\nu}{2})} M\left(\frac{1-\nu}{2}; \frac{3}{2}; \frac{z_1^2}{2}\right),$$

em que  $M$  é uma função hipergeométrica confluyente e sua expansão pode ser dada em série de potências, ou seja,

$$M(b; c; z) = 1 + \frac{b}{c} \frac{z}{1!} + \frac{b(b+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{b^{(s)} z^s}{c^{(s)} s!}$$

sendo  $b^{(s)} = b(b+1)(b+2) \dots (b+s-1)$ .

Se  $D_\nu(z_1)$  é solução da equação (2.6),  $D_\nu(-z_1)$  também é solução da mesma equação. Portanto, a solução particular de (2.7) é  $D_\nu(-z_2)$ . As autofunções devem ser proporcionais a  $D_\nu(z_1)$  para  $x$  positivos e a  $D_\nu(-z_2)$  para  $x$  negativos, resultando em:

$$\psi(x) = N \begin{cases} D_\nu(\sqrt{2}(x - \alpha)) & (x \geq 0) \\ \pm D_\nu(-\sqrt{2}(x + \alpha)) & (x \leq 0) \end{cases} \tag{2.9}$$

o sinal positivo é usado para a função de onda par e o sinal negativo é para a função de onda ímpar.  $N$  é a constante de normalização.

Uma característica da equação de Schrödinger para potenciais simétricos com relação à origem é que as funções de onda têm paridades bem definidas, serão funções pares e ímpares. Impondo a continuidade da função de onda encontrada e sua derivada em  $x = 0$ , sendo que este ponto é onde os dois potenciais parabólicos tendem a ser descontínuos, têm-se as seguintes condições:

$$\frac{d}{dx} D_\nu(\sqrt{2}(x-\alpha)) \Big|_{x=0} = 0 \quad \text{para } \psi \text{ par} \quad (2.10)$$

$$D_\nu(-\sqrt{2}\alpha) = 0 \quad \text{para } \psi \text{ ímpar.} \quad (2.11)$$

Através das equações transcendentais (2.10) e (2.11) é possível obter os autovalores de energia, esses valores dependem do valor adotado de  $\sqrt{2}\alpha$ .

Na Figura 2.2 estão apresentadas as curvas de  $\nu$  em função de  $\sqrt{2}\alpha$ .

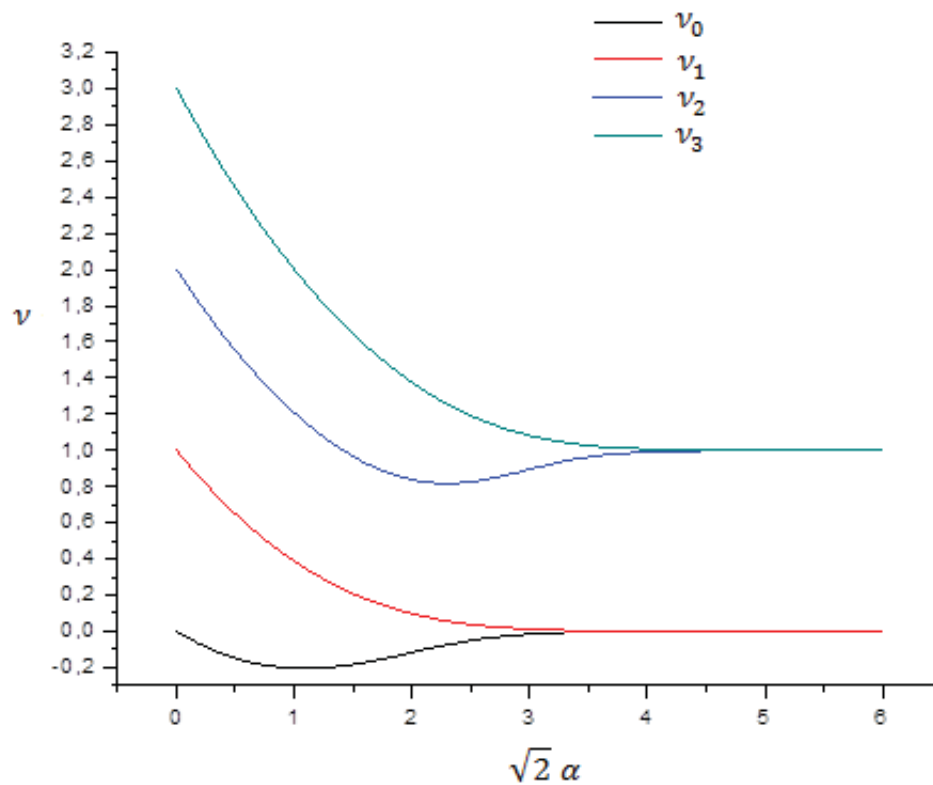


Figura 2.2:  $\nu$  versus  $\sqrt{2}\alpha$  para os quatro primeiros níveis de energia do oscilador harmônico duplo.

Na Tabela 2.1 estão os resultados dos valores de  $\nu$  para  $\sqrt{2}\alpha = 2$ ,  $\sqrt{2}\alpha = 4$  e  $\sqrt{2}\alpha = 6$ , para os dez primeiros níveis de energia.

Tabela 2.1: Resultados dos valores de  $\nu$  obtidos das equações transcendentais (2.10) e (2.11) considerando  $\sqrt{2}\alpha = 2$ ,  $\sqrt{2}\alpha = 4$  e  $\sqrt{2}\alpha = 6$ .

$\nu_n$	$\sqrt{2}\alpha = 2$	$\sqrt{2}\alpha = 4$	$\sqrt{2}\alpha = 6$
$\nu_0$	-0,11685	-0,00039	$-2,52 \cdot 10^{-8}$
$\nu_1$	0,09727	0,00049	$3,53 \cdot 10^{-8}$
$\nu_2$	0,83756	0,99961	0,99999986
$\nu_3$	1,37521	1,00665	1,00000141
$\nu_4$	2,11354	1,97077	1,99998106
$\nu_5$	2,79324	2,03760	2,00001890
$\nu_6$	3,55871	3,03819	2,99979085
$\nu_7$	4,30059	3,12301	3,00018486
$\nu_8$	5,09081	3,89338	3,99853015
$\nu_9$	5,86729	4,28036	4,00124305

Na Figura 2.3 são apresentadas as curvas do potencial (2.2) para os três valores de  $\alpha$  analisados:

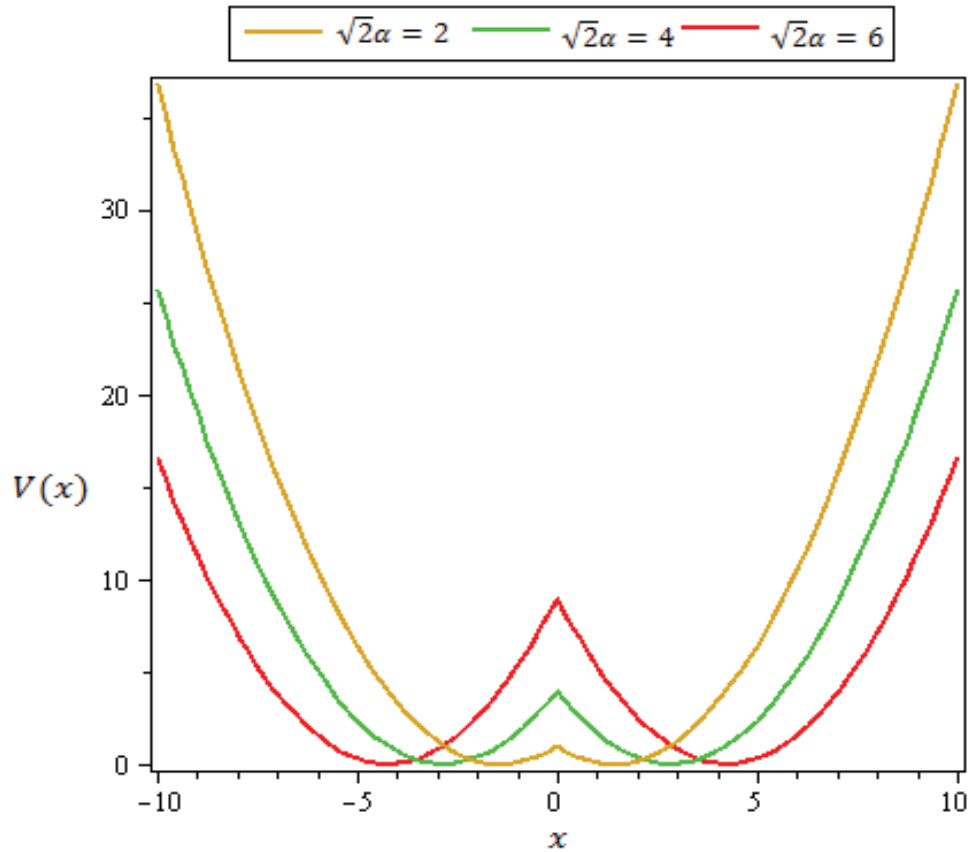


Figura 2.3: Gráfico do potencial (2.2) com  $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$ ,  $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$ ,  $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$  e  $m = \omega = 1$ .

O potencial (2.2) tem dois mínimos simétricos separados por uma barreira de energia em  $x = 0$ , onde o potencial é dado por  $V(0) = \frac{1}{2}\alpha^2$ . Os mínimos dos potenciais representados na Figura 2.3 são  $\alpha = \pm \frac{2}{\sqrt{2}}$ ,  $\alpha = \pm \frac{4}{\sqrt{2}}$ ,  $\alpha = \pm \frac{6}{\sqrt{2}}$  e  $V(0) = 1$ ,  $V(0) = 4$  e  $V(0) = 9$ , respectivamente.



## CAPÍTULO 3

### A EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK PARA UM POTENCIAL BIESTÁVEL SIMÉTRICO

O objetivo deste capítulo é apresentar o método de solução analítica da equação de Fokker-Planck para um sistema relacionado ao oscilador harmônico duplo, caracterizado por uma energia potencial com dois mínimos de energia ( $\pm\alpha$ ). Fazendo um mapeamento da equação de Fokker-Planck para a equação de Schrödinger, como descrito no capítulo anterior, é permitido o uso de métodos de soluções da equação de Schrödinger para determinar os autovalores e as autofunções a serem usados na construção da solução da equação de Fokker-Planck. Desse modo, é possível descrever a dinâmica do sistema através da evolução temporal da distribuição de probabilidade  $P(x, t)$  determinada.

#### 3.1. Equação de Fokker-Planck associada à equação de Schrödinger para o potencial do oscilador harmônico duplo

A equação tipo-Schrödinger (1.30) a ser resolvida é dada por:

$$-\frac{\Gamma}{2} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_{ef}(x) \psi(x) = -\Lambda_n \psi(x), \quad (3.1)$$

em que o termo referente ao potencial efetivo é igual ao potencial estudado  $V(x)$  (1.31), ou seja,

$$V_{ef}(x) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{[f(x)]^2}{\Gamma} - \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right\} = \frac{1}{2} (|x| - \alpha)^2 + C. \quad (3.2)$$

Como mostrado na expressão acima, o potencial efetivo está relacionado a uma força  $f(x)$ , portanto, pode-se procurar uma força que forneça um potencial efetivo similar ao potencial original. A força sugerida neste caso tem a forma:

$$f(x) = \beta - \gamma x,$$

sendo que  $\beta$  e  $\gamma$  são parâmetros determinados pela seguinte equação,

$$\frac{1}{2} \left\{ \frac{(\beta - \gamma x)^2}{\Gamma} - \gamma \right\} = \frac{1}{2} (|x| - \alpha)^2 + C. \quad (3.3)$$

Desenvolvendo os quadrados perfeitos e rearranjando os termos tem-se

$$\frac{\gamma^2 x^2}{\Gamma} - \frac{2x\gamma\beta}{\Gamma} + \frac{\beta^2}{\Gamma} - \gamma = x^2 - 2|x|\alpha + \alpha^2 + 2C. \quad (3.4)$$

Comparando os termos proporcionais as exponenciais de mesma ordem na equação acima, é possível identificar:

$$\gamma = \sqrt{\Gamma}, \quad (3.5.a)$$

$$\beta = \begin{cases} \alpha\sqrt{\Gamma} & (x > 0) \\ -\alpha\sqrt{\Gamma} & (x < 0) \end{cases} \quad (3.5.b)$$

e

$$C = -\frac{\sqrt{\Gamma}}{2}. \quad (3.5.c)$$

Portanto, pode-se escrever a forma de  $f(x)$  utilizando (3.5.a) e (3.5.b) como,

$$f(x) = -\sqrt{\Gamma} \begin{cases} (x - \alpha) & (x > 0) \\ (x + \alpha) & (x < 0) \end{cases} \quad (3.6)$$

sendo  $\Gamma = 2D$ , em que  $D$  é o coeficiente de difusão.

Então, o potencial efetivo escrito em termos de (3.6) é dado por:

$$V_{ef}(x) = \frac{1}{2} [ (|x| - \alpha)^2 - \sqrt{2D} ]. \quad (3.7)$$

Substituindo a expressão (3.7) na equação tipo-Schrödinger (3.1) e considerando  $D = 0,5$ , obtém-se

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} (|x| - \alpha)^2 \psi(x) = \left( \frac{1}{2} - \Lambda_n \right) \psi(x). \quad (3.8)$$

A solução da equação (3.8) é análoga à solução da equação de Schrödinger desenvolvida no capítulo II (MERZBACHER, 1970), ou seja,

$$\psi(x) = N \begin{cases} D_v (\sqrt{2}(x - \alpha)) & (x \geq 0) \\ \pm D_v (-\sqrt{2}(x + \alpha)) & (x \leq 0) \end{cases} \quad (3.9)$$

$N$  é a constante de normalização.

Os autovalores de energia  $\Lambda_n$  são obtidos da comparação direta da equação (3.8) com a equação de Schrödinger (2.3). Foi adicionada ao potencial original uma constante  $-\varepsilon$  a fim

de deslocar os níveis de energia e obter o primeiro autovalor ( $\Lambda_0$ ) da equação como sendo nulo. É importante ressaltar que essa constante não altera os resultados obtidos, embora estabeleça que o estado fundamental tenha autovalor nulo, condição importante para descrever o estado estacionário.

Dessa maneira, têm-se

$$E + \varepsilon = \frac{1}{2} - \Lambda_n.$$

Lembrando que  $E = \nu + \frac{1}{2}$ , então:

$$\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon). \quad (3.10)$$

Observa-se que o valor de  $\varepsilon$  é igual a  $-\nu_0$ , o que implica em  $\Lambda_0 = 0$ .

Tendo determinado os autovalores (3.10) e as autofunções (3.9), podemos obter a distribuição de probabilidade  $P(x, t)$  (1.40). Os resultados numéricos estão apresentados no próximo capítulo.

## CAPÍTULO 4

### RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos do estudo da equação de Fokker-Planck para o oscilador harmônico duplo para três casos distintos, ou seja, com diferentes tamanhos da barreira de energia. O coeficiente de difusão é considerado constante,  $D = 0,5$ , o que implica em um valor de  $\gamma$  igual a um,  $\gamma = 1$ .

Para efeito de cálculo numérico, a somatória na expressão utilizada no cálculo da distribuição de probabilidade (1.40) é truncada no décimo termo, por isso utiliza-se até o nono nível de energia ( $n = 9$ ) e suas respectivas funções de onda. Desse modo, a distribuição de probabilidade obtida através da expressão (1.40) considerando a condição inicial  $x_0 = -2$  é

$$P(x, t) = [\psi_0(x)]^2 + \frac{\psi_0(x)}{\psi_0(-2)} \sum_{n=1}^9 \psi_n(-2)\psi_n(x)e^{-t|\Lambda_n|}. \quad (4.1)$$

A fim de observar a evolução temporal do sistema calculam-se as probabilidades totais em função do tempo através das integrais do lado esquerdo ( $x < 0$ ) e do lado direito ( $x > 0$ ) da distribuição de probabilidade (4.1), sendo  $N_1$  e  $N_2$ , respectivamente. Portanto, têm-se as seguintes expressões (JUN & WEAVER, 2002):

$$N_1(t) = \int_{-10}^0 P(x, t) dx \quad (4.2)$$

$$N_2(t) = \int_0^{10} P(x, t) dx. \quad (4.3)$$

Em termos numéricos, é considerado o estado estacionário quando  $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$  for da ordem de  $10^{-3}$ . O tempo,  $t_c$ , para atingir o equilíbrio define a condição de que

metade da amostra está do lado esquerdo ( $x < 0$ ) e a outra metade está do lado direito ( $x > 0$ ) do poço de potencial. Esse resultado é esperado, uma vez que se trata de um potencial biestável simétrico em que as probabilidades são iguais nos mínimos do potencial. O interesse do estudo com  $t_c$  é analisá-lo em diferentes condições iniciais  $x_0$ , ou seja, variando os valores de  $x_0$  no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) obtém-se o tempo quando a condição adotada  $\Delta N(t) \leq 10^{-3}$  é atingida. Esses cálculos são feitos para valores de  $x_0$  sempre negativos,  $x_0 < 0$ .

Os cálculos mencionados acima são realizados para os três casos estudados: no primeiro caso  $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$ ; no segundo caso  $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$  e no terceiro e último caso  $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$ . Por fim, é feita a análise dos resultados.

#### 4.1. Primeiro caso: $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$

O potencial efetivo (3.7) para este primeiro caso é dado por:

$$V_{ef}(x) = \frac{1}{2} \left[ \left( |x| - \frac{2}{\sqrt{2}} \right)^2 - 1 \right]. \quad (4.4)$$

que possui a forma apresentada na Figura 4.1.

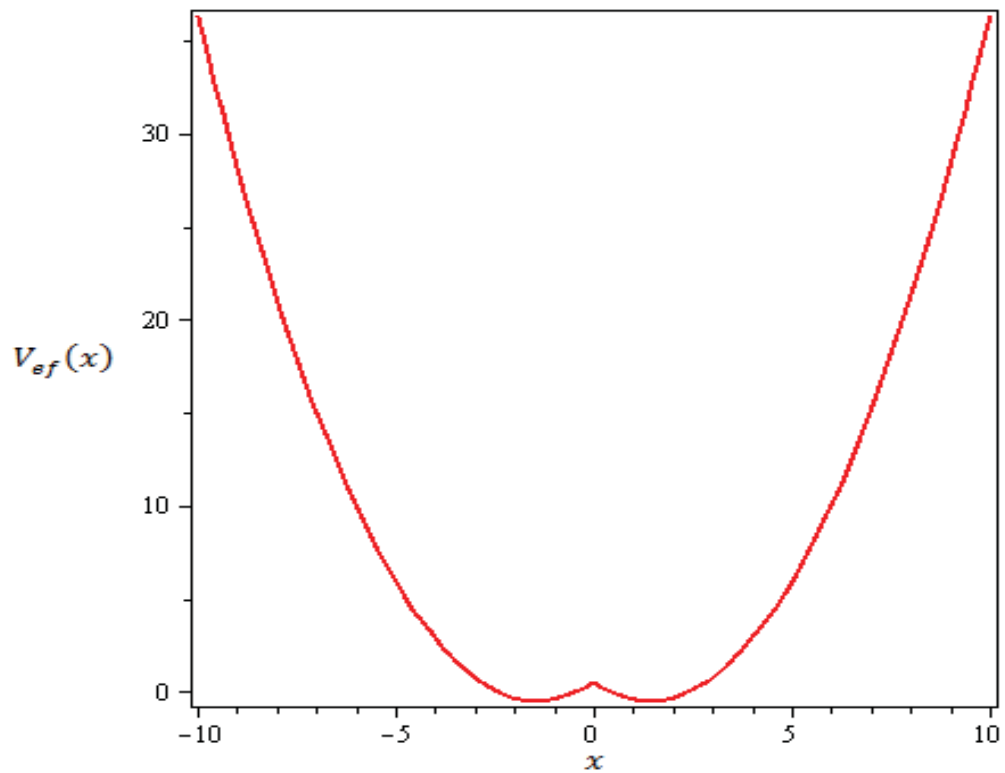


Figura 4.1: Potencial (4.4) em função da coordenada  $x$  para  $\alpha = 2/\sqrt{2}$ .

Na Tabela 4.1 estão os resultados dos autovalores de energia  $\Lambda_n$  expressos em (3.10). Como indicado no capítulo anterior,  $\varepsilon = -\nu_0$ , neste caso, o valor de  $\nu_0$  é  $-0,11685$  (vide Tabela 2.1), ou seja,  $\varepsilon = 0,11685$ . Todos os resultados da Tabela 4.1 estão deslocados desse valor, o que implica em  $\Lambda_0 = 0$ .

Tabela 4.1: Resultados dos autovalores de energia,  $\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon)$ , para o oscilador harmônico duplo com  $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$ .

---



---

$ \Lambda_0 $	0
$ \Lambda_1 $	0,21412
$ \Lambda_2 $	0,95441
$ \Lambda_3 $	1,49205
$ \Lambda_4 $	2,23035
$ \Lambda_5 $	2,91009
$ \Lambda_6 $	3,67556
$ \Lambda_7 $	4,41744
$ \Lambda_8 $	5,20765
$ \Lambda_9 $	5,98415

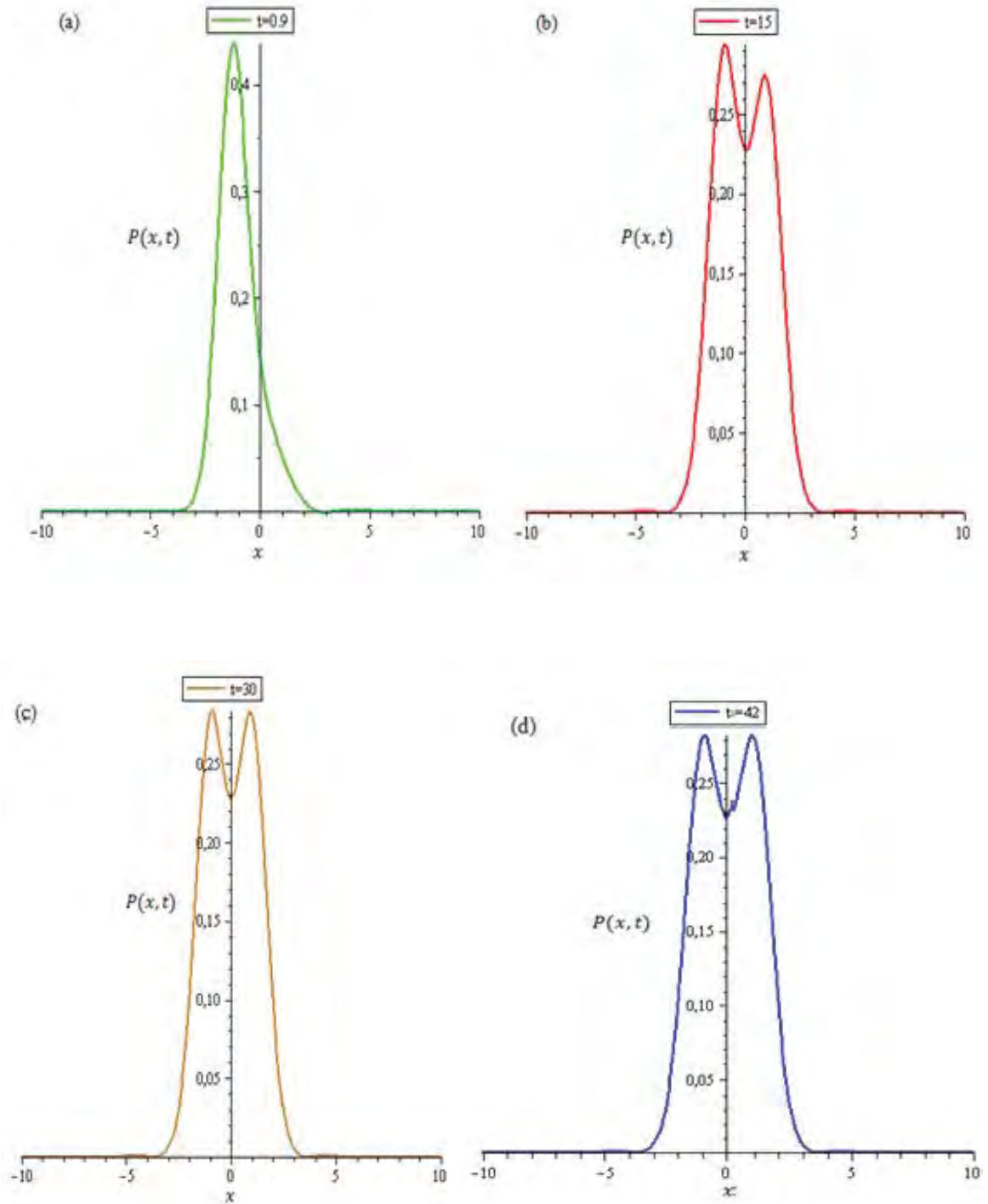
---

Para o cálculo numérico, a somatória na expressão da distribuição de probabilidade (4.1) é truncada no décimo termo, ou seja, são utilizados até o nono nível de energia e suas respectivas funções de onda são indicadas na expressão (4.5),

$$\psi(x) = N \begin{cases} D_\nu \left( \sqrt{2} \left( x - \frac{2}{\sqrt{2}} \right) \right) & (x \geq 0) \\ \pm D_\nu \left( -\sqrt{2} \left( x + \frac{2}{\sqrt{2}} \right) \right) & (x \leq 0) \end{cases} \quad (4.5)$$



A Figura 4.2 mostra a evolução temporal de  $P(x, t)$ , desde o tempo mínimo Figura 4.2 (a) onde se obtém a configuração dada pela condição inicial até o tempo para atingir o estado estacionário Figura 4.2 (d).



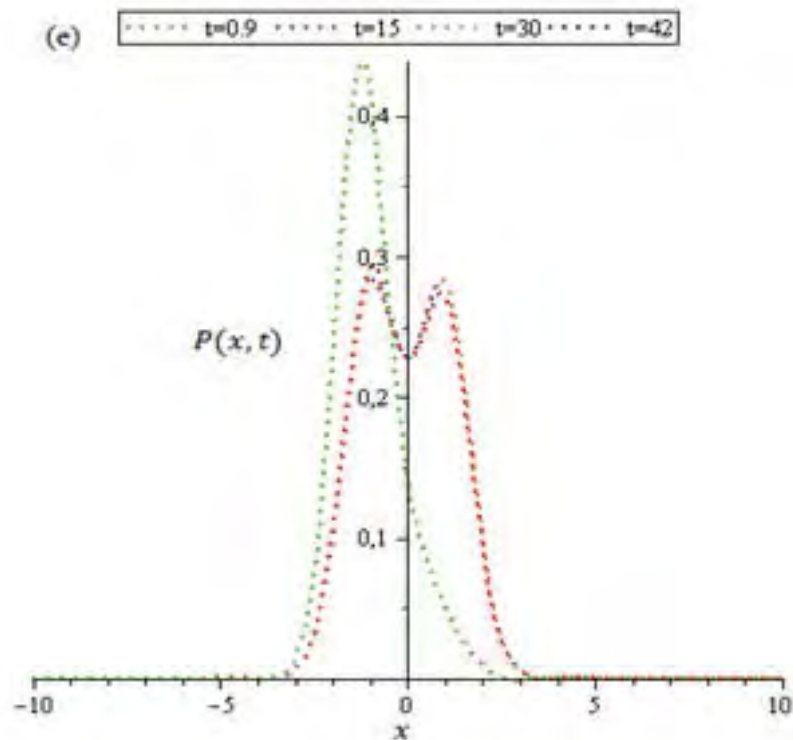


Figura 4.2: Resultados obtidos no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) utilizando dez termos da série e com os seguintes parâmetros:  $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$  e  $x_0 = -2$ . As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a distribuição de probabilidade para quatro valores diferentes de tempo e em (e) todas as curvas são agrupadas evidenciando a evolução temporal do sistema.

Utilizando as expressões (4.2) e (4.3), obtêm-se as curvas, Figura 4.3 (a), da população total na região de cada mínimo em função do tempo. Observa-se a evolução temporal das probabilidades totais e o comportamento do sistema desde o início, onde toda a população está concentrada em  $x_0$ , até o estado estacionário, onde as probabilidades são iguais entre os dois mínimos do potencial. Na Figura 4.3 (b), têm-se o resultado de  $\Delta N(t)$ .

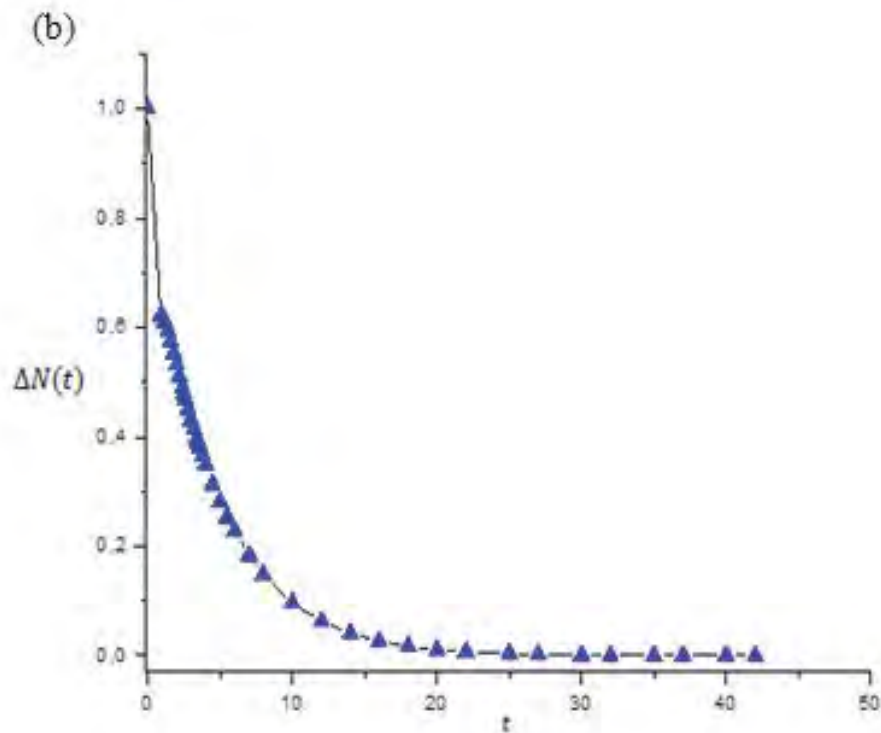
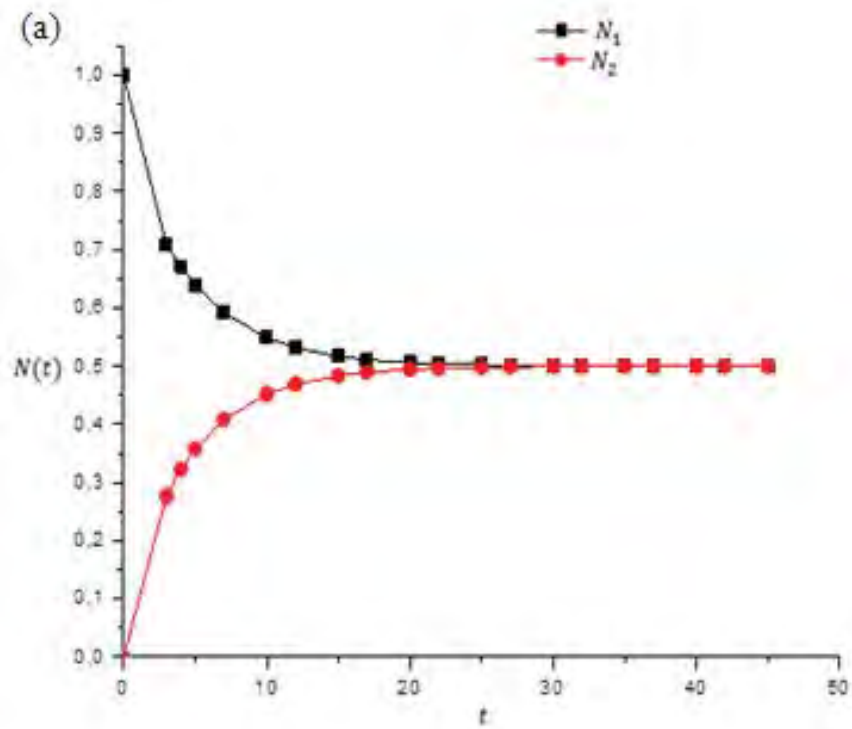


Figura 4.3: No gráfico (a) estão apresentadas as curvas das probabilidades totais em função do tempo para  $N_1(t)$  (4.2) e  $N_2(t)$  (4.3) e em (b) esta a curva de  $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$  em função do tempo.

Um tempo característico a ser usado,  $t_c$ , define a condição de que metade da amostra do sistema está antes da barreira de energia e a outra metade está depois da barreira de energia. Ao fixar  $x_0$  e calcular o tempo característico a partir da condição inicial adotada, é possível obter um tempo de forma mais específica, ao utilizar o seguinte parâmetro:  $\Delta N(t) \leq 10^{-3}$ . Usando este critério, determina-se  $t_c$  para diferentes valores de  $x_0$ , no intervalo de  $-0,1 \leq x_0 \leq -2,8$ . Em outras palavras, observa-se a evolução temporal do sistema para diferentes valores de condição inicial ( $x_0$ ). O resultado é apresentado na Figura 4.4.

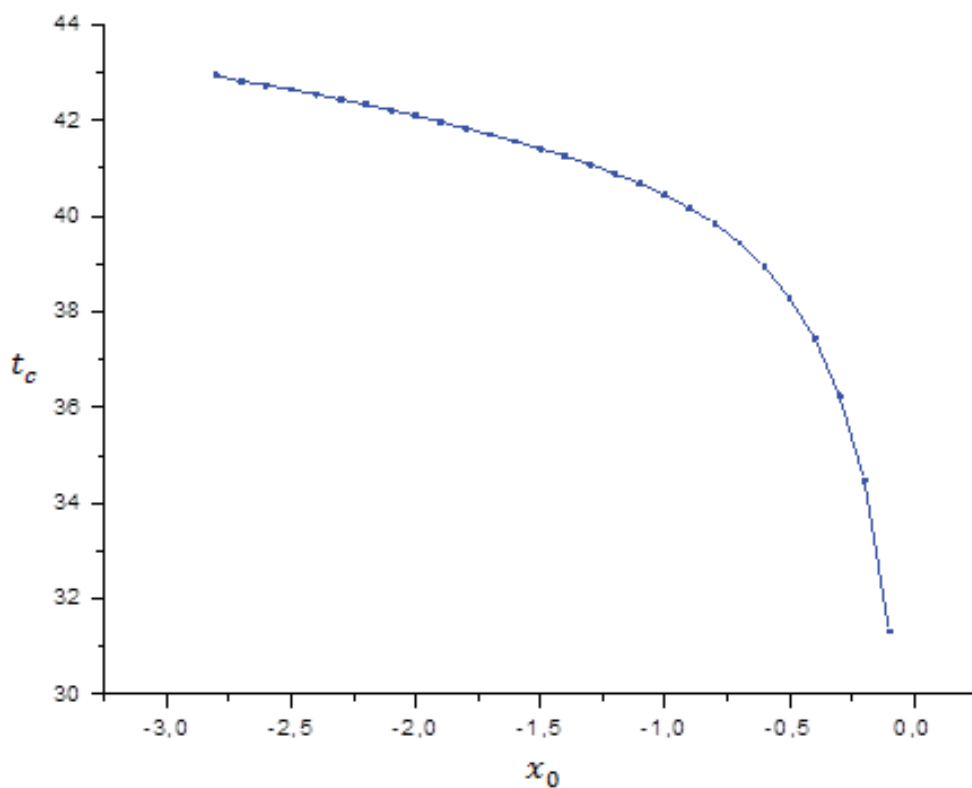


Figura 4.4: Relação entre os tempos  $t_c$ , que define o estado estacionário do sistema, e as condições iniciais  $x_0$  variando de  $-0,1$  a  $-2,8$ .

A figura 4.4 mostra o comportamento de  $t_c$  em função da condição inicial adotada. Há uma região onde  $t_c$  diminui lentamente com a posição inicial e outra região onde o tempo decresce acentuadamente. Este último comportamento ocorre quando  $x_0$  se aproxima da barreira de energia em  $x = 0$ .

Outra maneira de obter um tempo característico do sistema é ajustar exponencialmente a curva da Figura 4.3 (b),  $\Delta N(t) = Ae^{-t/\tau}$ . Porém, devido a perda de informações do sistema para tempos menores que  $t = 0,9$ , o ajuste da Figura 4.3 (b) para uma exponencial é brusca.

Esse ajuste foi feito para diferentes condições iniciais, para cada  $x_0$ , obtém-se um tempo característico  $\tau$ . O resultado está apresentado na Figura 4.5.

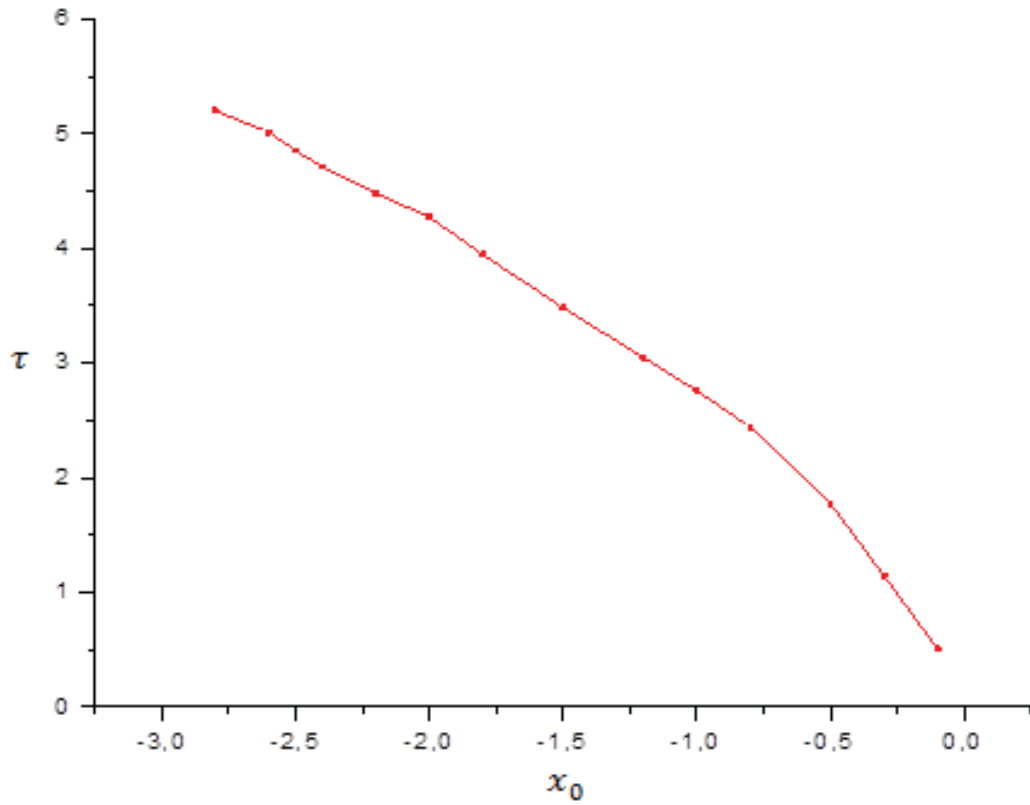


Figura 4.5: Relação entre o tempo característico  $\tau$  e a condição inicial do sistema  $x_0$ .

O comportamento da curva na Figura 4.5 tem as mesmas características da curva na Figura 4.4, quando a condição inicial está próxima da barreira de energia, o tempo característico é menor, conforme  $x_0$  se afasta da barreira,  $t_c$  aumenta.

## 4.2. Segundo caso: $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$

No segundo caso, o potencial efetivo é:

$$V_{ef}(x) = \frac{1}{2} \left[ \left( |x| - \frac{4}{\sqrt{2}} \right)^2 - 1 \right], \quad (4.6)$$

e possui a forma indicada na Figura 4.6.

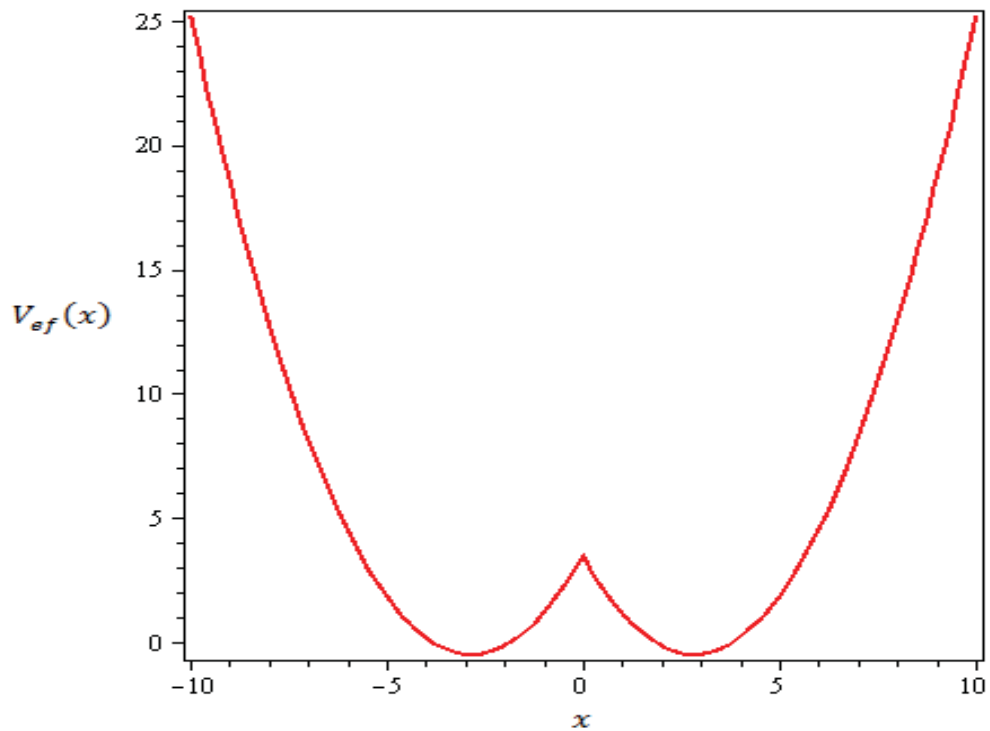


Figura 4.6: Potencial (4.6) em função da coordenada  $x$  para  $\alpha = 4/\sqrt{2}$ .

Os resultados dos autovalores de energia  $\Lambda_n$  encontram-se na Tabela 4.2. Nesse caso, o valor de  $\nu_0$  é  $-0,00039$  (vide Tabela 2.1), portanto,  $\varepsilon = 0,00039$ .

Tabela 4.2: Resultados dos autovalores de energia,  $\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon)$ , para o oscilador harmônico duplo com  $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$ .

---



---

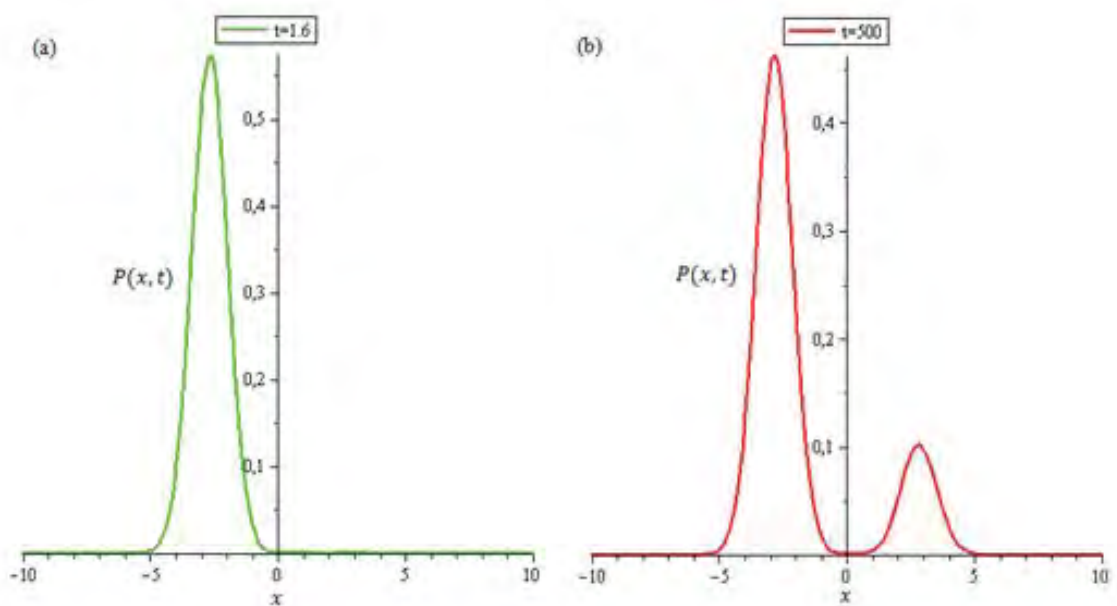
$ \Lambda_0 $	0
$ \Lambda_1 $	0,00107
$ \Lambda_2 $	0,99194
$ \Lambda_3 $	1,00724
$ \Lambda_4 $	1,94814
$ \Lambda_5 $	2,03817
$ \Lambda_6 $	2,85676
$ \Lambda_7 $	3,12361
$ \Lambda_8 $	3,83501
$ \Lambda_9 $	4,28094

---

A somatória da distribuição de probabilidade dada pela expressão (4.1) é truncada no décimo termo, os valores de  $\Lambda_n$  utilizados nos cálculos estão descritos na Tabela 4.2 e suas respectivas funções de onda são:

$$\psi(x) = N \begin{cases} D_\nu \left( \sqrt{2} \left( x - \frac{4}{\sqrt{2}} \right) \right) & (x \geq 0) \\ \pm D_\nu \left( -\sqrt{2} \left( x + \frac{4}{\sqrt{2}} \right) \right) & (x \leq 0) \end{cases} \quad (4.7)$$

O resultado das distribuições de probabilidade  $P(x, t)$ , via equação (4.1), está apresentado na Figura 4.7. Para o tempo mínimo, Figura 4.7 (a), a distribuição de probabilidade mostra que o sistema está concentrado antes da barreira de energia. A Figura 4.7 (b)-(c) apresenta  $P(x, t)$  mostrando o sistema se difundindo para os mínimos do potencial até atingir o equilíbrio Figura 4.7 (d). No estado estacionário, para tempos muito grandes, o termo exponencial, dependente do tempo da expressão (4.1), torna-se desprezível se comparado ao primeiro termo da série.





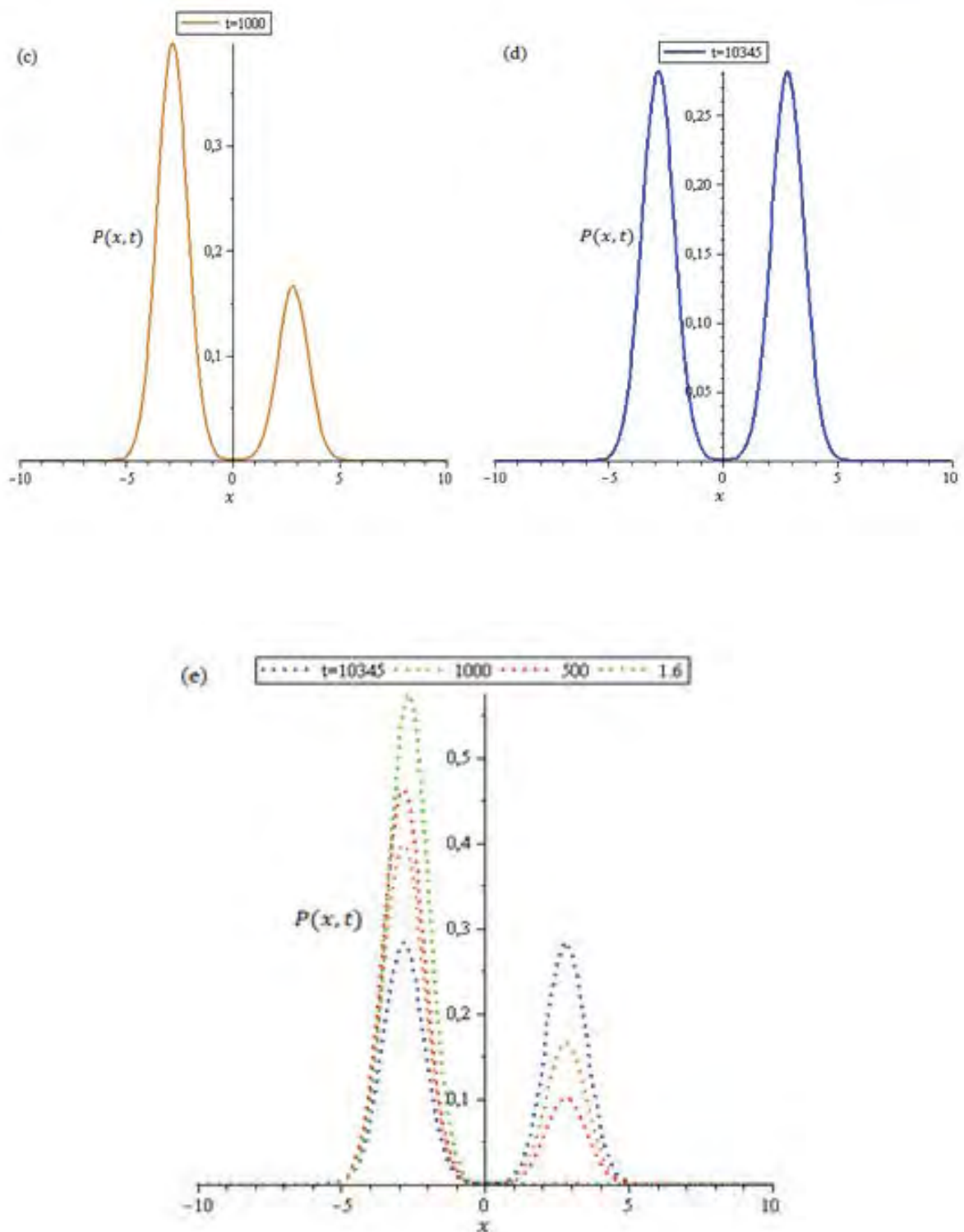
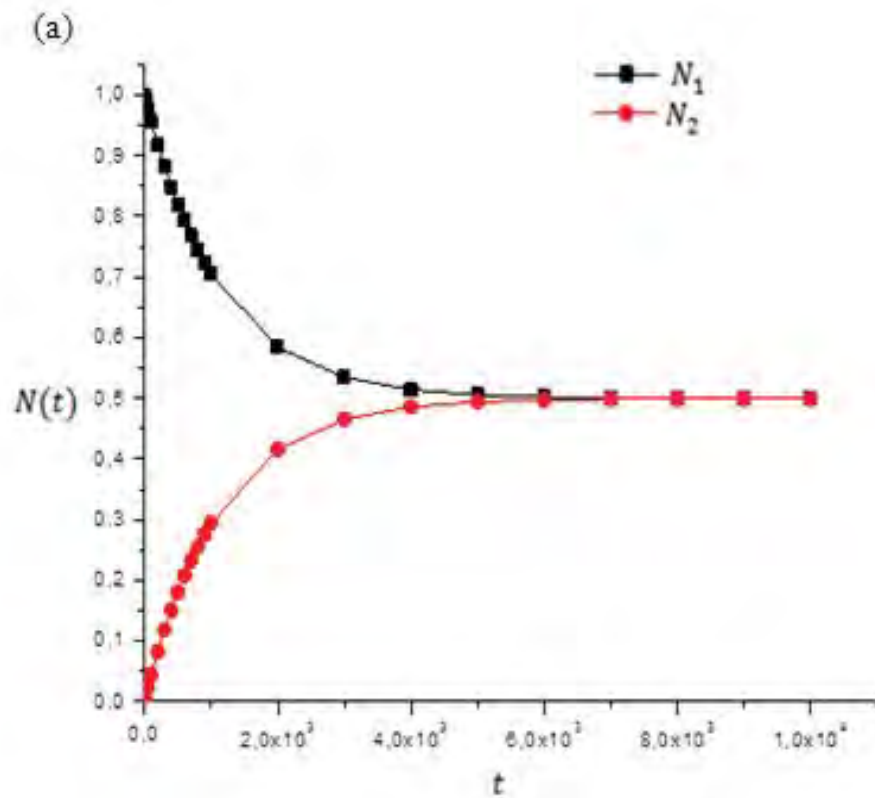


Figura 4.7: Resultados obtidos no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) utilizando dez termos da série e com os seguintes parâmetros:  $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$  e  $x_0 = -2$ . As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a distribuição de probabilidade para quatro valores diferentes de tempo e em (e) todas as curvas são agrupadas, o que evidencia a evolução temporal do sistema.

Na Figura 4.8 (a) estão apresentados os gráficos das probabilidades totais  $N_1$  e  $N_2$  a partir das expressões (4.2) e (4.3), respectivamente. As curvas,  $N_1$  e  $N_2$ , representam a difusão da probabilidade total do sistema, que inicialmente está concentrado em  $x_0 = -2$ , em função do tempo. Como esperado, no equilíbrio, as probabilidades de encontrar os sistema em cada um dos mínimos do potencial são iguais. Na Figura 4.8 (b) está o resultado obtido de  $\Delta N(t)$  em função do tempo.



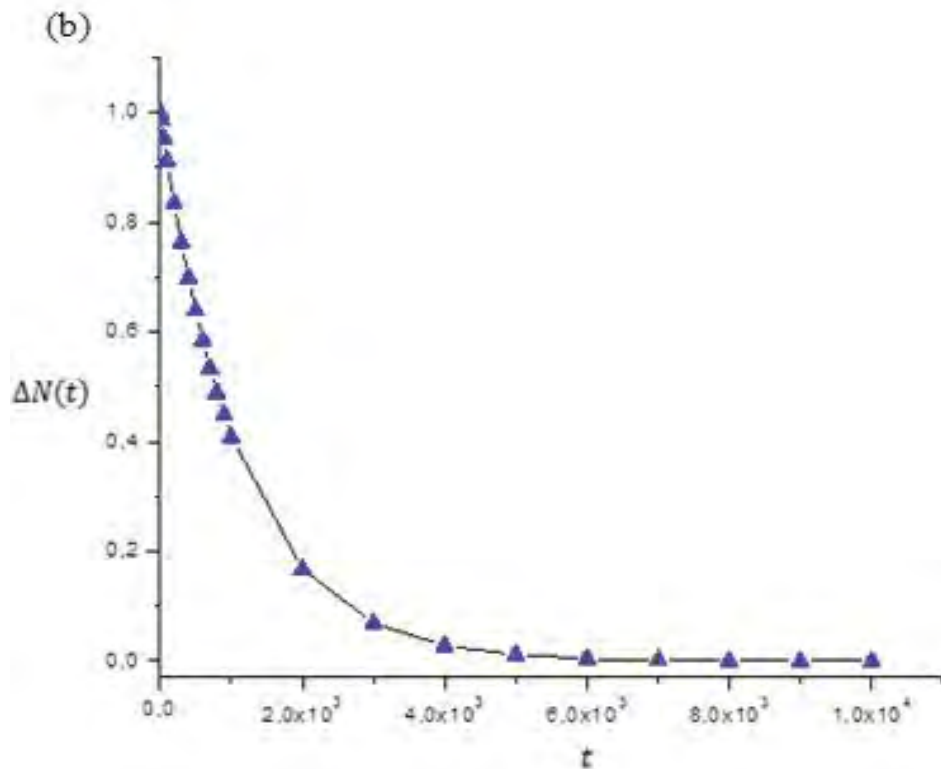


Figura 4.8: No gráfico (a) estão apresentadas as curvas das probabilidades totais em função do tempo para  $N_1(t)$  (4.2) e  $N_2(t)$  (4.3) e em (b) esta a curva de  $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$  em função do tempo.

O tempo  $t_c$  é obtido da mesma forma que no caso I, ou seja, quando o critério estabelecido para o estado estacionário é alcançado. O comportamento de  $t_c$  em função da condição inicial no intervalo de  $-0,1 \leq x_0 \leq -4,5$  está mostrado na Figura 4.9.

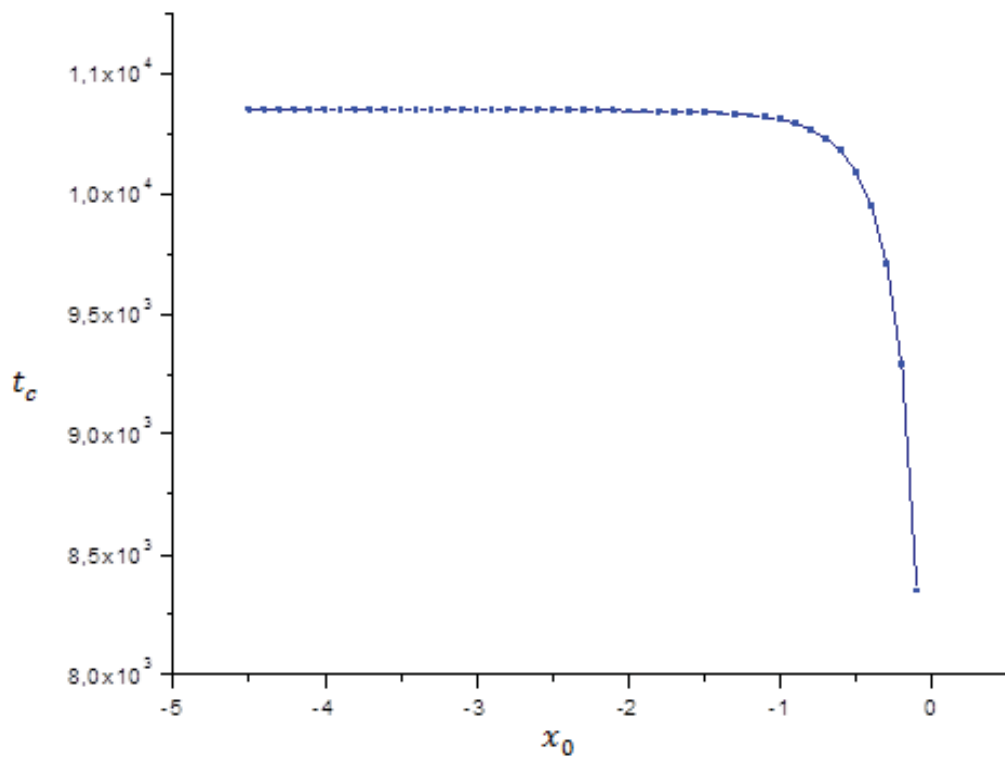


Figura 4.9: Relação entre os tempos  $t_c$ , que define o estado estacionário do sistema, e as condições iniciais  $x_0$  variando de  $-0,1$  a  $-4,5$ .

Analisando a Figura 4.9, é possível identificar uma região em que  $t_c$  fica praticamente constante e outra região, próximo a zero, onde o tempo decresce rapidamente com  $x_0$ .

Através do ajuste exponencial da curva na Figura 4.8 (b), obtém-se um tempo característico do sistema. Esse tempo característico  $\tau$  pode ser encontrado para diferentes condições iniciais adotadas, o resultado encontrado é apresentado na Figura 4.10.

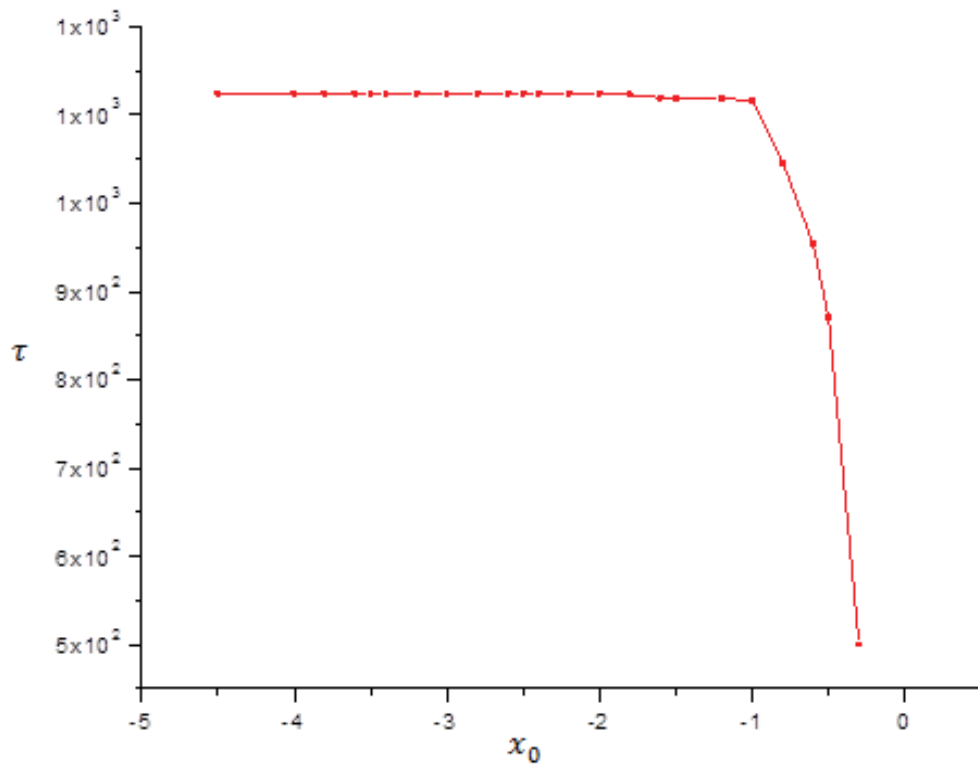


Figura 4.10: Relação entre o tempo característico  $\tau$  e a condição inicial do sistema  $x_0$ .

A Figura 4.10 é semelhante à Figura 4.9, também é possível identificar uma região em que  $\tau$  fica praticamente constante e outra região, próximo a zero, onde o tempo decresce rapidamente com  $x_0$ .

### 4.3. Terceiro caso: $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$

Por fim, os resultados do último caso, no qual considera-se uma barreira de energia maior do que nos dois primeiros casos estudados anteriormente. O potencial efetivo é dado por:

$$V_{ef}(x) = \frac{1}{2} \left[ \left( |x| - \frac{6}{\sqrt{2}} \right)^2 - 1 \right], \quad (4.8)$$

A forma gráfica para este potencial, dado em (4.8), está apresentada na Figura 4.11.

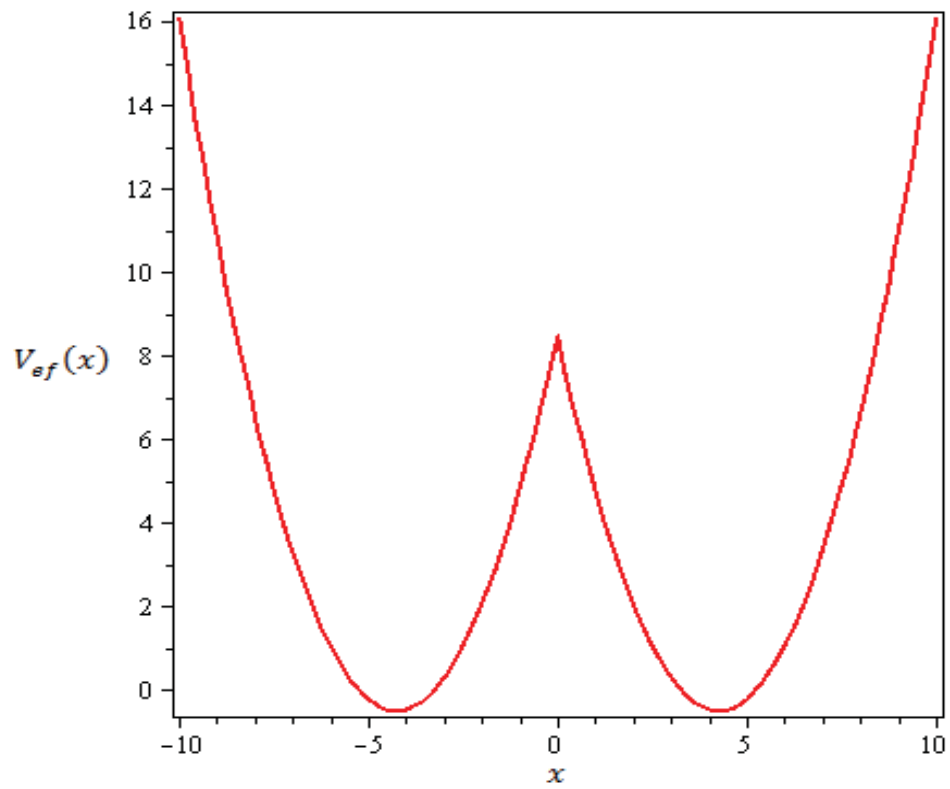


Figura 4.11: Potencial (4.8) em função da coordenada  $x$  para  $\alpha = 6/\sqrt{2}$ .

Na Tabela 4.3, estão os autovalores de energia, com  $\varepsilon = 2,52 \cdot 10^{-8}$ .

Tabela 4.3: Resultados dos autovalores de energia,  $\Lambda_n = -(\nu + \varepsilon)$ , para o oscilador harmônico duplo com  $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$ .

---



---

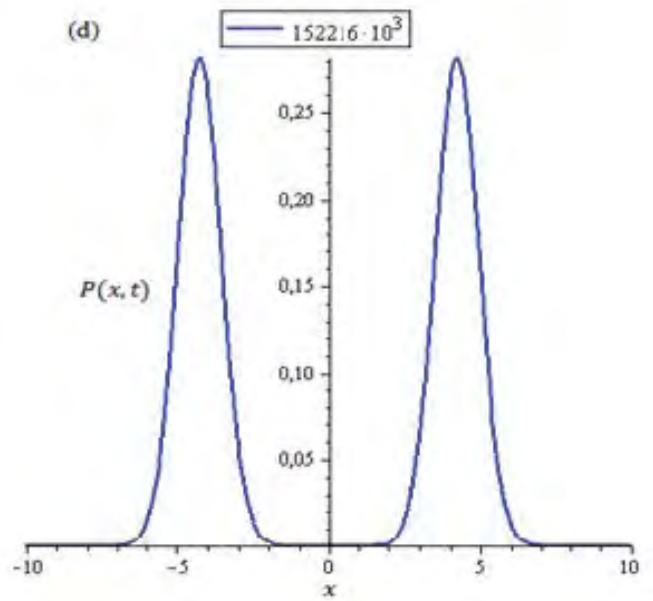
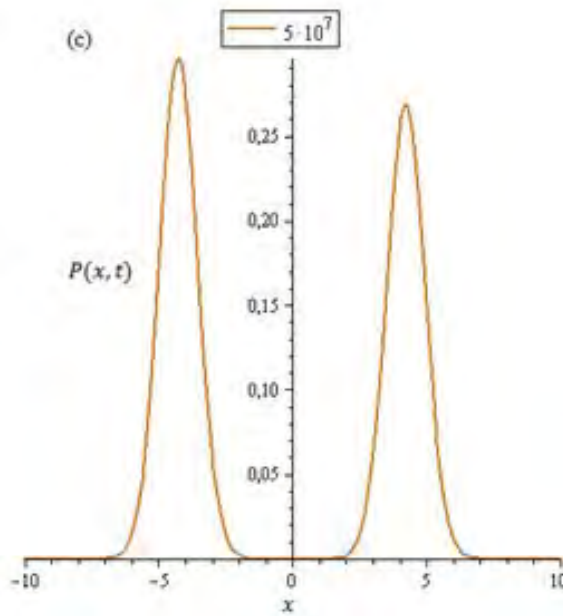
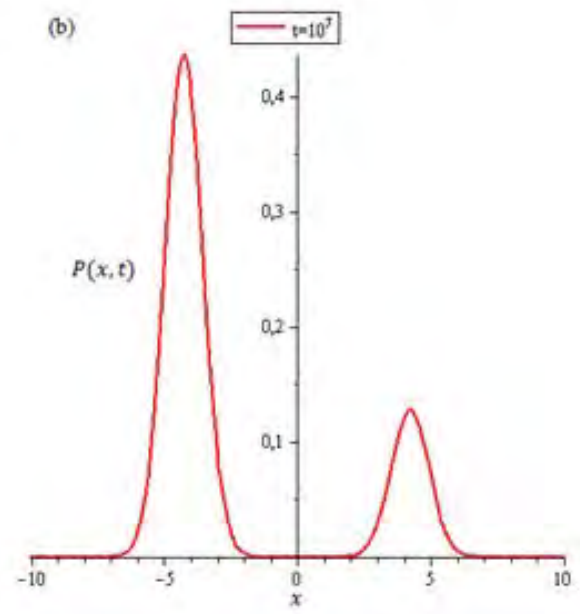
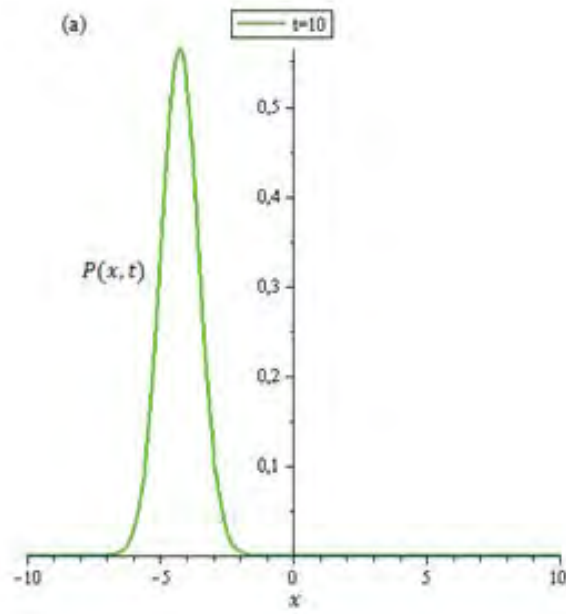
$ \Lambda_0 $	0
$ \Lambda_1 $	$0,605 \cdot 10^{-9}$
$ \Lambda_2 $	0,99998
$ \Lambda_3 $	1,00001
$ \Lambda_4 $	1,99998
$ \Lambda_5 $	2,00001
$ \Lambda_6 $	2,99979
$ \Lambda_7 $	3,00018
$ \Lambda_8 $	3,99853
$ \Lambda_9 $	4,00124

---

As funções de onda descritas abaixo,

$$\psi(x) = N \begin{cases} D_\nu \left( \sqrt{2} \left( x - \frac{6}{\sqrt{2}} \right) \right) & (x \geq 0) \\ \pm D_\nu \left( -\sqrt{2} \left( x + \frac{6}{\sqrt{2}} \right) \right) & (x \leq 0) \end{cases} \quad (4.9)$$

e os autovalores de energia Tabela 4.3 são utilizados para calcular a distribuição de probabilidade segundo a expressão (4.1) com dez termos, isto é,  $n = 9$ . O resultado obtido encontra-se na Figura 4.12 para diferentes valores de tempo, Figura 4.12 (a)-(d), e todos os tempos juntos na Figura 4.12 (e) para evidenciar a evolução temporal de  $P(x, t)$ . Nas curvas apresentadas foi adotado  $x_0 = -2$ .





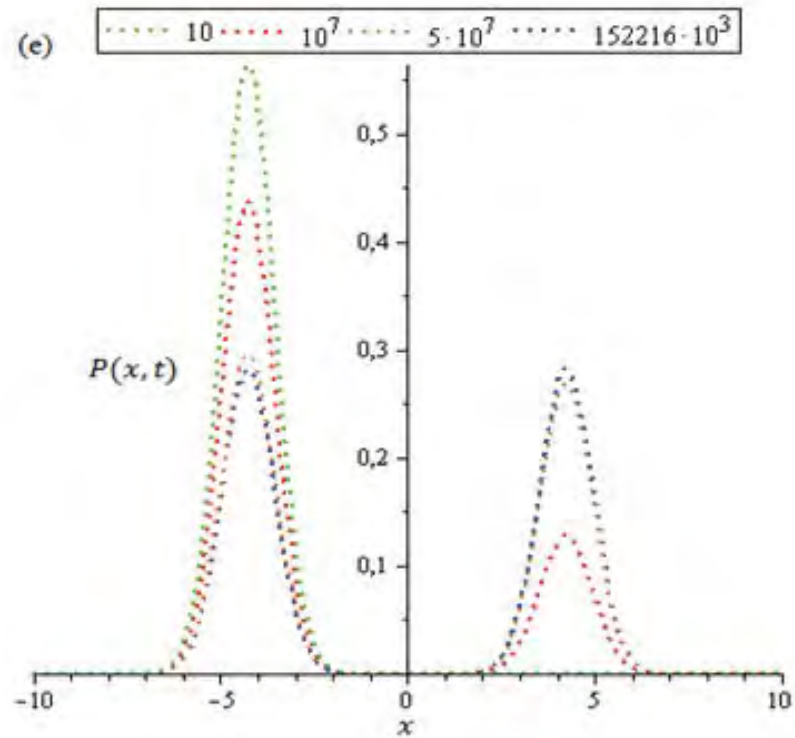


Figura 4.12: Resultados obtidos no cálculo da distribuição de probabilidade (4.1) utilizando dez termos da série e com os seguintes parâmetros:  $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$  e  $x_0 = -2$ . As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a distribuição de probabilidade para quatro valores diferentes de tempo e em (e) todas as curvas são agrupadas evidenciando a evolução temporal do sistema.

As probabilidades totais  $N_1(t)$  e  $N_2(t)$ , expressões (4.2) e (4.3), respectivamente estão apresentadas a seguir na Figura 4.13.

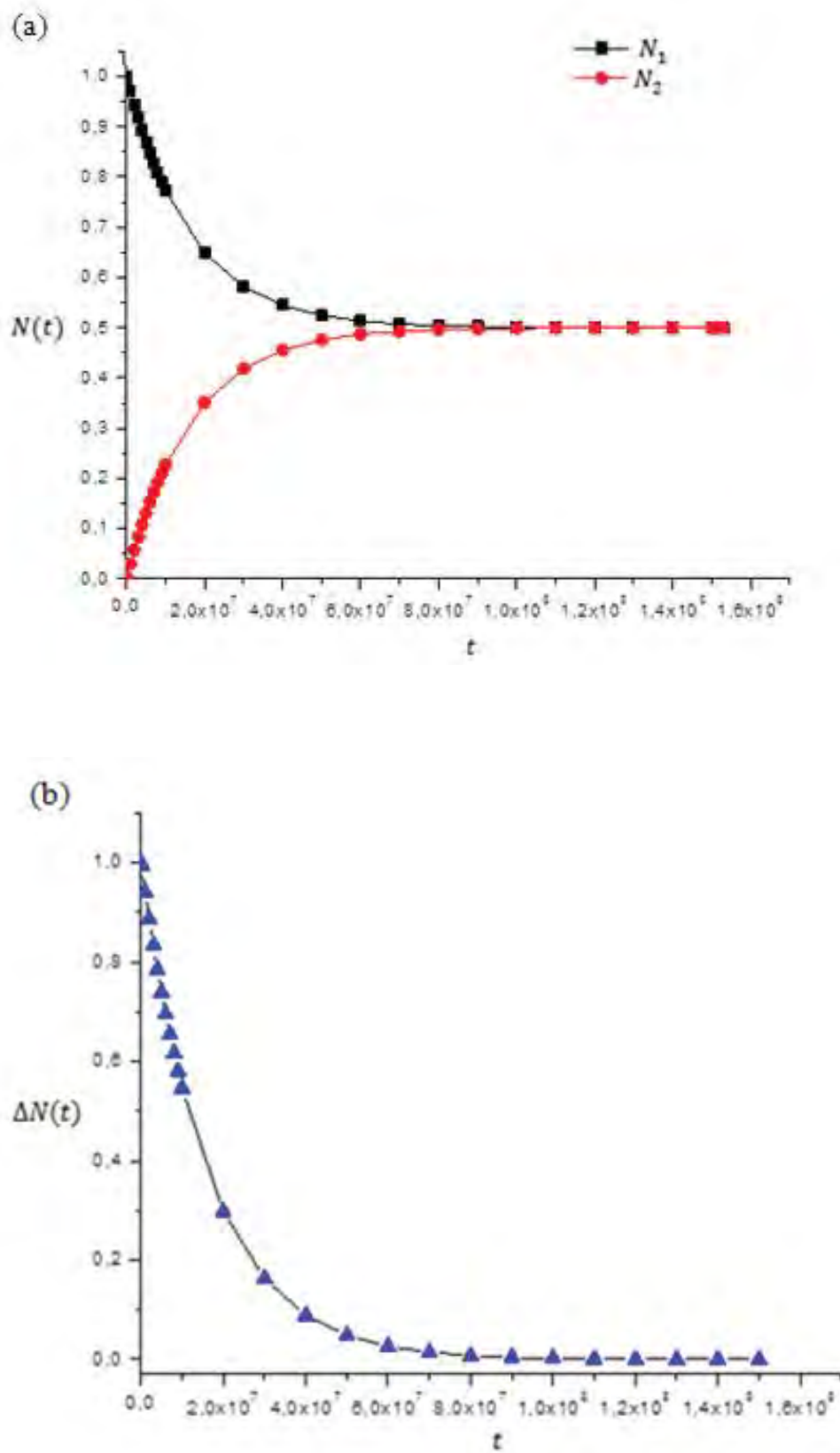


Figura 4.13: No gráfico (a), estão apresentadas as curvas das probabilidades totais em função do tempo para  $N_1(t)$  (4.2) e  $N_2(t)$  (4.3) e em (b) esta a curva de  $\Delta N(t) = N_1(t) - N_2(t)$  em função do tempo.

O critério utilizado para obter o tempo  $t_c$  para diferentes condições iniciais foi o mesmo daquele usado nos primeiros casos estudados. A Figura 4.14 mostra o comportamento de  $t_c$  em função da condição inicial no intervalo de  $-0,1 \leq x_0 \leq -6,8$ .

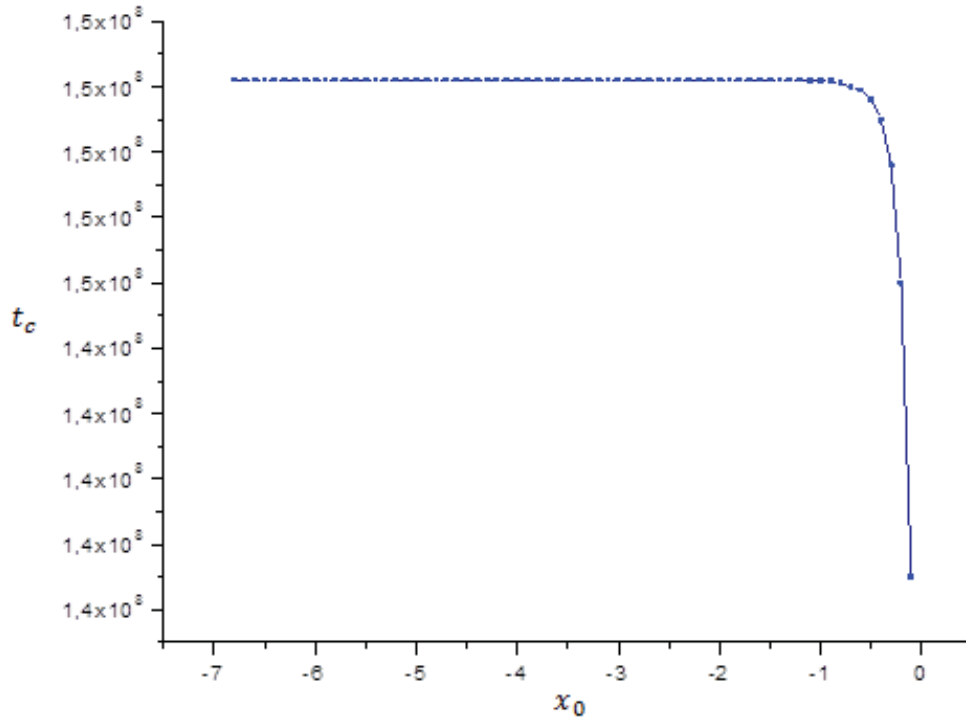


Figura 4.14: Relação entre os tempos  $t_c$ , que define o estado estacionário do sistema e as condições iniciais  $x_0$  variando de  $-0,1$  a  $-6,8$ .

Na Figura 4.14 existe uma região em que  $t_c$  fica praticamente constante e outra região, próximo à barreira de energia, onde o tempo decresce rapidamente com  $x_0$ .

Ajustando exponencialmente a Figura 4.13 (b),  $\Delta N(t) = Ae^{-t/\tau}$ , é possível obter um tempo característico  $\tau$  do sistema da mesma forma que nos casos anteriores. Esse ajuste foi feito para diversos valores de  $x_0$ , assim têm-se os valores de  $\tau$  correspondente a cada condição inicial (vide Figura 4.15).

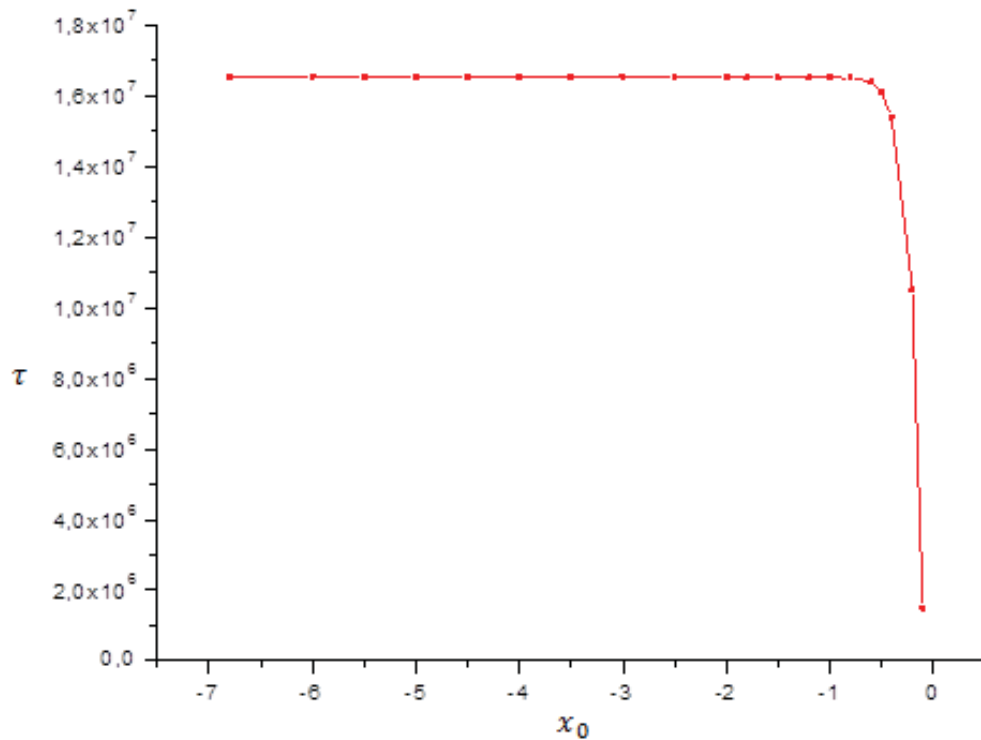


Figura 4.15: Relação entre o tempo característico  $\tau$  e a condição inicial do sistema  $x_0$ .

O comportamento da curva na Figura 4.15 é semelhante ao comportamento da curva na Figura 4.14.

#### 4.4. Análise dos Resultados

O objetivo de considerar a condição inicial,  $x_0$ , negativo no cálculo da distribuição de probabilidade é de colocar o sistema do lado esquerdo da barreira de energia e analisar seu comportamento através da evolução temporal. Pelas Figuras 4.2, 4.7 e 4.12 pode-se observar o processo de transição entre os dois mínimos do potencial para os três casos estudados.

Para tempos pequenos, a distribuição de probabilidade se aproxima da função delta de Dirac, cuja expansão é uma série infinita. A necessidade de truncamento da série de  $P(x, t)$  gera erros, por esta razão, os resultados obtidos indicam que para tempos muito pequenos há necessidade de um número maior de termos na série. Sendo assim, foi fixado o número de termos na expansão e diminuído o valor do tempo até que os resultados se mostrassem inconsistentes, ou seja, o aparecimento de valores negativos para a probabilidade. Esses

tempos mínimos são diferentes para cada caso, no item (a) das Figuras 4.2, 4.7 e 4.12 estão representadas as curvas referentes a  $t = 0,9$ ,  $t = 1,6$  e  $t = 10$ , respectivamente. No estado estacionário, item (d) de cada uma dessas figuras, as probabilidades de encontrar o sistema próximo a cada mínimo dos poços são iguais, isto indica que a região mais provável de se encontrar o sistema é a posição de menor energia do potencial. A fim de verificar esses resultados, foi feita uma comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário com a somatória de duas gaussianas  $P_1$  e  $P_2$  para  $x \geq 0$  e  $x \leq 0$ , respectivamente. Esses resultados estão mostrados no apêndice A.

Pode-se observar que o tamanho da barreira de energia influencia no tempo mínimo e no tempo do estado estacionário. Este comportamento está mostrado na Tabela 4.4 e nas Figuras 4.2, 4.7 e 4.12.

Tabela 4.4: Valores do tempo mínimo e do tempo do estado estacionário para os três casos estudados.

Parâmetro do potencial	$\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$	$\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$	$\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$
Tempo mínimo calculado com dez termos na expansão de $P(x, t)$	0,9	1,6	10
Tempo para atingir o estado estacionário segundo o critério de que $\Delta N(t) \leq 10^{-3}$	42	10345	$152216 \cdot 10^3$

Quanto menor o tamanho da barreira de energia, os tempos de transições também são menores, vide Tabela 4.4. O tempo de transição é dado pelo tempo que o sistema leva para atravessar a barreira de energia em  $x = 0$ , a região de transição.

As Figuras 4.3 (a), 4.8 (a) e 4.13 (a) apresentam os resultados das probabilidades totais em função do tempo através das expressões (4.2) e (4.3). Por causa da função delta em  $t = 0$ , envolver  $x_0$  negativo todo o sistema está inicialmente do lado esquerdo da barreira de energia. Observa-se que inicialmente a probabilidade é um para  $N_1$  e a probabilidade é zero para  $N_2$ . Os cálculos para obtenção gráfica dessas figuras são efetivamente feitos a partir dos tempos

mínimos de cada caso. Pode-se observar que para tempos menores a probabilidade é maior para  $N_1$  e conforme o tempo aumenta essas probabilidades se igualam.

Nas Figuras 4.4, 4.9 e 4.14, quando a condição inicial está próxima da barreira, o tempo característico  $t_c$  é menor, conforme  $x_0$  se afasta da barreira,  $t_c$  aumenta. Isso mostra que se deve levar em conta a distância da condição inicial até a barreira para estabelecer o tempo de transição. Observa-se que a partir de  $x_0$  próximo ao mínimo do poço, o tempo fica constante, exceto para a Figura 4.4 que os tempos estão bem próximos, mas não constantes. Isso se deve ao fato da barreira de energia ser muito pequena, o que não influencia muito nos tempos de transição. Esse resultado discutido acima também pode ser observado nas Figuras 4.5, 4.10 e 4.15, para um tempo característico  $\tau$  obtido através do ajuste exponenciais das Figuras 4.3 (b), 4.8 (b) e 4.13 (b).

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi obtida a solução analítica da equação de Fokker-Planck para um potencial relacionado ao oscilador harmônico duplo. Pelo fato da equação de Fokker-Planck ser associada à equação de Schrödinger, a solução da equação tipo Schrödinger é semelhante à solução da equação de Schrödinger para este potencial (vide capítulo II e capítulo III). Desta forma, potenciais resolvidos quanticamente podem ser traduzidos para a equação de Fokker-Planck.

O potencial estudado é um potencial biestável simétrico em relação à origem. Desse modo, pode-se observar a evolução temporal do sistema e o processo de transição entre os dois mínimos do potencial. Inicialmente a distribuição de probabilidade  $P(x, t)$  se aproxima de uma função delta, condição inicial do sistema, Figuras 4.2 (a), 4.6 (a) e 4.10 (a). E no equilíbrio, o termo exponencial dependente do tempo torna-se desprezível se comparado com o primeiro termo da série, e o estado estacionário é atingido mostrando que as probabilidades de encontrar o sistema próximo a cada mínimo dos poços são iguais, Figuras 4.2 (d), 4.6 (d) e 4.10 (d), o que era esperado, já que a região mais provável de encontrar o sistema é próximo à posição de menor energia do potencial. As curvas da distribuição de probabilidade em todos os casos estão normalizadas.

Os resultados da variação do tempo  $t_c$  em relação à condição inicial  $x_0$  são qualitativamente parecidos com o resultado obtido pelo método de Monte Carlo (CHAHINE, OLIVEIRA, LEITE & WANG, 2007). Outra maneira de obter um tempo característico do sistema é através do ajuste exponencial das Figuras 4.3 (b), 4.8 (b) e 4.13 (b). Sendo assim, pode-se analisar que o comportamento das curvas para  $\tau$  nas Figuras 4.5, 4.10 e 4.15 são semelhantes ao comportamento das curvas para  $t_c$  nas Figuras 4.4, 4.9 e 4.14.

Através das soluções analíticas obtidas, pode-se concluir que a metodologia utilizada é consistente e permite uma análise qualitativa do sistema. Uma aplicação para o tratamento sugerido está relacionada com o processo de enovelamento protéico na temperatura de enovelamento. Essa condição é refletida no fato de a cadeia ter possibilidades iguais de ser encontrada em cada um dos seus dois estados, enovelada e desenovelada.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of mathematical functions*. New York: Dover Publications, 1970.

BORGES, G. R. P.; DRIGO FILHO, E.; RICOTTA, R. M. Variational supersymmetric approach to evaluate Fokker-Planck probability. *Physica A*, v. 389, p. 3892-3899, 2010.

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.

CHAHINE, J.; OLIVEIRA, R. J.; LEITE, V. B. P.; WANG, J. Configuration-dependent diffusion can shift the kinetic transition state and barrier height of protein folding. *Proc. Acad. Sci. USA*, v. 104, p. 14646-14651, 2007.

CURTISS, C. F.; BIRD, R. B. Fokker-Planck equation for the one-molecule distribution function in polymer mixtures and its solution. *Journal of Chemical Physics*, v. 106, p. 9899-9921, 1997

DRIGO FILHO, E. *Supersimetria aplicada à Mecânica Quântica*. São Paulo: Ed. UNESP, 2009.

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

EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.

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.

LAGE, E. J. S. *Física Estatística*. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1995.

MERZBACHER, E. *Quantum mechanics*. 2<sup>nd</sup> ed. New York: John Wiley & Sons, 1970.

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.



PETERS, M. H. Fokker-Planck equation and the grand molecular friction tensor for coupled rotational and translational motions of structured Brownian particles near structured surfaces. *Journal of Chemical Physics*, v. 110, p. 528-538, 1999.

REICHL, L.E. *A Modern Course in Statistical Physics*. New York: J. Wiley, 1998.

REIF, F. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. New York: McGraw-Hill, 1985.

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

SCHIFF, L. I. *Quantum Mechanics*. New York: McGraw-Hill, 1955.

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

VARADA, G.V.; AGARWAL, G. S. Quantum-statistical properties of a particle in a Double-harmonic-statistical potential: Generation on Schrödinger-cat States. *Physics Review A*, v. 48, p. 462-467, 1993.

## APÊNDICE A

Neste apêndice são analisados os resultados da distribuição de probabilidade no estado estacionário representados nas Figuras 4.2 (d), 4.7 (d) e 4.12 (d) com a soma de duas gaussianas,  $P_g(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t)$ . As gaussianas estão apresentadas nas seguintes expressões (RISKEN, 1989):

$$P1(x, t) = \left( \frac{\pi}{2D(1 - e^{-2t})} \right)^{1/2} e^{-\left( \frac{(x-\alpha) - x_1 e^{-t}}{2D(1 - e^{-2t})} \right)^2} \quad \text{para } x \geq 0 \quad (\text{A.1})$$

e

$$P2(x, t) = \left( \frac{\pi}{2D(1 - e^{-2t})} \right)^{1/2} e^{-\left( \frac{(x+\alpha) - x_2 e^{-t}}{2D(1 - e^{-2t})} \right)^2} \quad \text{para } x \leq 0 \quad (\text{A.2})$$

### A.1. Análise do primeiro caso: $\alpha = \frac{2}{\sqrt{2}}$

Com a finalidade de confirmar a similaridade entre a distribuição de probabilidade do estado estacionário na Figura 4.2 (d) com a soma das gaussianas,  $P_g(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t)$ , foi feito um gráfico com as duas curvas. Neste gráfico, Figura A.1, foi usado para  $\alpha = 2/\sqrt{2}$ , os seguintes parâmetros:  $D = 0,5$ ,  $x_1 = x_2 = 0$  e  $t = 42$ .

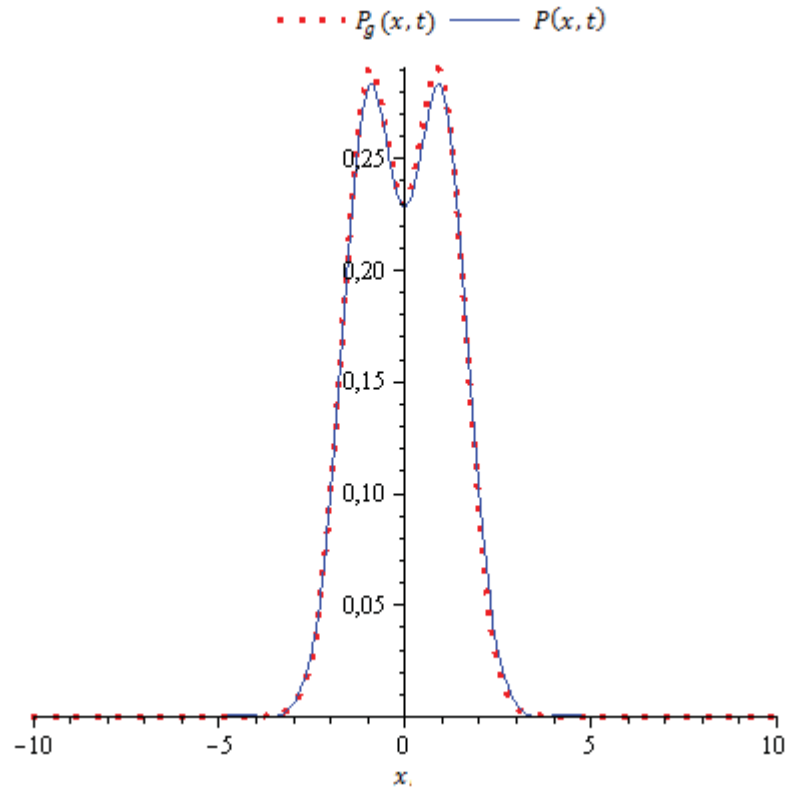


Figura A.1: Comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário, Figura 4.2 (d) e a soma das gaussianas (A.1) e (A.2) para  $\alpha = 2/\sqrt{2}$ .

## A.2. Análise do segundo caso: $\alpha = \frac{4}{\sqrt{2}}$

Com o objetivo de confirmar a similaridade entre a distribuição de probabilidade do estado estacionário na Figura 4.7 (d) com a soma das gaussianas,  $P_g(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t)$ , foi feito um gráfico com as duas curvas. Neste gráfico, Figura A.2, foi usado para  $\alpha = 4/\sqrt{2}$ , os seguintes parâmetros:  $D = 0,5$ ,  $x_1 = x_2 = 0$  e  $t = 10345$ .

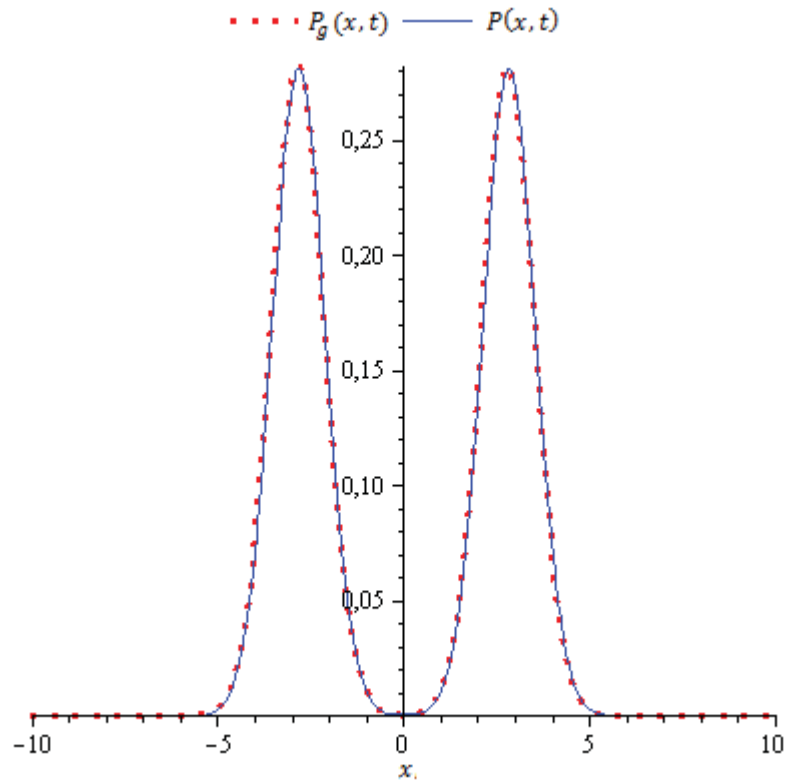


Figura A.2: Comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário, Figura 4.7 (d), e a soma das gaussianas (A.1) e (A.2) para  $\alpha = 4/\sqrt{2}$ .

### A.3. Análise do terceiro caso: $\alpha = \frac{6}{\sqrt{2}}$

Com o propósito de confirmar a similaridade entre a distribuição de probabilidade do estado estacionário na Figura 4.12 (d) com a soma das gaussianas,  $P_g(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t)$ , foi feito um gráfico com as duas curvas. Neste gráfico, Figura A.3, foi usado para  $\alpha = 6/\sqrt{2}$ , os seguintes parâmetros:  $D = 0,5$ ,  $x_1 = x_2 = 0$  e  $t = 152216 \cdot 10^3$ .

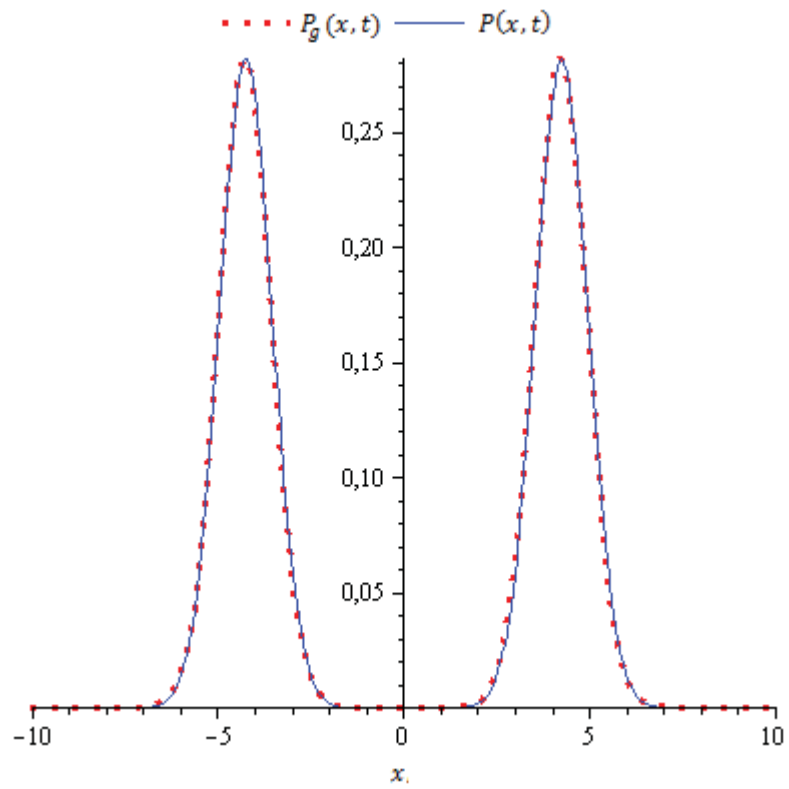


Figura A.3: Comparação gráfica da distribuição de probabilidade para o estado estacionário, Figura 4.12 (d) e a soma das gaussianas (A.1) e (A.2) para  $\alpha = 6/\sqrt{2}$ .