

"ESTUDO DE ALGUNS ASPECTOS DO ÁCIDO DESOXIRRIBONUCLEICO (DNA)  
E MECÂNICA QUÂNTICA SUPERSIMÉTRICA"

ELSO DRIGO FILHO



Tese apresentada ao Instituto de Física  
Teórica - UNESP, São Paulo, para obtenção  
do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Ruggiero

São Paulo, 1992

IFT/TE-D-37

DEDICO À

Meus pais e meus filhos

Uma geração anterior e uma geração posterior

Passado e futuro

Um legado e uma esperança.

## AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas colaboraram direta ou indiretamente fornecendo os meios para que este trabalho fosse concluído. Pretendo destacar algumas que durante o período de desenvolvimento e elaboração tiveram um papel bastante importante, às vezes fundamental.

A primeira pessoa que vem a memória é o Dr. José Roberto Ruggiero que durante o período que trabalhamos juntos se mostrou bem mais que um orientador acadêmico. Em termos profissionais, possibilitou uma liberdade de ação e apoio que em muito ajudou no desenvolvimento de uma maturidade, em termos de pesquisa científica. Esteve sempre pronto a esclarecer, estudar e discutir todos pontos necessários bem como estratégias e caminhos a serem seguidos. Extremamente crítico e meticuloso permitiu que os temas fossem bastante explorados dando uma segurança conceitual sobre os assuntos abordados. Em termos pessoais, acredito que existem poucas pessoas capazes de desenvolverem uma amizade e de se preocuparem com os outros como ele. Em suma, foi um bom orientador e um amigo ainda melhor.

Um aspecto importante para poder desenvolver este trabalho foi o ambiente em que ele foi feito. Grande parte dele foi desenvolvido no Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas (IBILCE)/UNESP, Campus de São José do Rio Preto. O ambiente de camaradagem e apoio mútuo existente neste departamento foi extremamente motivante, tanto, em termos profissionais como pessoais. Particularmente, o Dr. João Ruggiero Neto colaborou muito em discussões frutíferas e estimulantes. Também colaborou a Vania Barlete, e os professores

Marcelo Fossey, Johnny R. Olivieri, Ramon B. Abrego, Jorge Chahine e Eloi S. Feitosa foram presenças constantes e importantes.

Outra parte deste trabalho foi feito no Instituto de Física Teórica (IFT) - UNESP, São Paulo. Durante este período o IFT fez jus à sua reputação de um Instituto de pesquisa sério e acolhedor. O contato com a Dr<sup>a</sup> Regina Maria Ricotta foi dos mais gratificantes, através de uma colaboração profissional fluida e de uma boa amizade. O Dr. Vicente Pleitez também colaborou muito, mantendo-se sempre informado, discutindo e sugerindo idéias e abordagens.

Em especial gostaria de agradecer ao Nicola (Centro de Computação do IBILCE) por sua pronta ajuda na parte computacional, a Maria José (IFT) por servir de intermediária rodando programas em São Paulo e enviando os resultados para S.J. Rio Preto e ao Marcelo (Biblioteca do IFT) que deu valiosa contribuição enviando sem demora artigos importantes inexistentes no IBILCE.

Por último, mas não em último, agradeço a Ilva que além da eficiente datilografia, cuidou de me lembrar dos prazos a serem seguidos.



## ABSTRACT

We study the thermic denaturation and some low frequency oscillations in DNA molecule. An important point of our approach is the potential which we use to simulate the Hydrogen bond. For this purpose we suggest a new potential, that is obtained by the formalism of the Supersymmetric Quantum Mechanics. The results obtained by us are compared with results obtained from other potentials and with experimental data. On the other hand, we use the superalgebra to indicate a method to generalize quantum potentials and to determine new exactly solvable potentials. We also show how to solve the Schrödinger equation through supersymmetry.

## CAPÍTULO I

I - INTRODUÇÃO .....	01
----------------------	----

## CAPÍTULO II

II - TRATAMENTO TEÓRICO PARA O DNA .....	06
i) PRELIMINARES .....	07
ii) DESNATURAÇÃO TÉRMICA .....	08
iii) MODOS DE BAIXA FREQUÊNCIA .....	12
iv) COMENTÁRIOS .....	24

## CAPÍTULO III

III- MECANICA QUANTICA SUPERSIMÉTRICA .....	26
i) PRELIMINARES .....	27
ii) FORMALISMO .....	27
iii) USANDO SUPERSIMETRIA PARA RESOLVER A EQUAÇÃO DE SCHRODINGER .....	31
iv) ENCONTRANDO NOVOS POTENCIAIS EXATAMENTE SOLÚVEIS ATRAVÉS DA SUPERSIMETRIA .....	38
v) COMENTÁRIOS .....	42

## CAPÍTULO IV

IV - NOVO POTENCIAL PARA SIMULAR AS PONTES DE HIDROGÊNIO NO DNA .....	44
i) PRELIMINARES .....	45
ii) NOVO POTENCIAL .....	46
iii) RESULTADOS .....	49
iv) COMENTÁRIOS .....	54

CAPITULO V

V - CONCLUSÃO ..... 56

APENDICE A

ESTRUTURA DO DNA ..... 61

APENDICE B

OPERADOR INTEGRAL DE TRANSFERÊNCIA ..... 66

APÊNDICE C

PARAMETROS ESTRUTURAIS DO DNA ..... 71

APENDICE D

CÁLCULO DO NOVO POTENCIAL PARA AS  
PONTES DE HIDROGENIO ..... 73

APÊNDICE E

CÁLCULO DA FUNÇÃO DE ONDA DO ESTADO FUNDAMENTAL  
PARA O NOVO POTENCIAL ..... 77

APÊNDICE F

DISTANCIA MÉDIA ENTRE PARES DE BASE TOMANDO  
UM POTENCIAL PURAMENTE HARMONICO ..... 81

BIBLIOGRFIA..... 85

Este livro contém os seguintes assuntos: a) a importância da educação para o desenvolvimento econômico e social do Brasil; b) a importância da educação para a formação do cidadão; c) a importância da educação para a formação do profissional; d) a importância da educação para a formação do líder.

Este livro contém os seguintes assuntos: a) a importância da educação para o desenvolvimento econômico e social do Brasil; b) a importância da educação para a formação do cidadão; c) a importância da educação para a formação do profissional; d) a importância da educação para a formação do líder.

## CAPITULO I

Este capítulo contém os seguintes assuntos: a) a importância da educação para o desenvolvimento econômico e social do Brasil; b) a importância da educação para a formação do cidadão; c) a importância da educação para a formação do profissional; d) a importância da educação para a formação do líder.

## INTRODUCAO

Este capítulo contém os seguintes assuntos: a) a importância da educação para o desenvolvimento econômico e social do Brasil; b) a importância da educação para a formação do cidadão; c) a importância da educação para a formação do profissional; d) a importância da educação para a formação do líder.

Este capítulo contém os seguintes assuntos: a) a importância da educação para o desenvolvimento econômico e social do Brasil; b) a importância da educação para a formação do cidadão; c) a importância da educação para a formação do profissional; d) a importância da educação para a formação do líder.

Esta tese possui um caráter essencialmente interdisciplinar envolvendo conceitos de Biofísica e de Teoria de Campos.

Em termos de Biofísica o sistema físico a ser estudado é o Ácido Desoxirribonucleico (DNA) que desempenha papel fundamental nos processos da vida, pois é responsável pelo armazenamento e transmissão da informação biológica através do código genético. O DNA é uma macromolécula bastante complexa, no apêndice A damos um quadro geral da sua estrutura, porém tem sido possível tratar teoricamente alguns fenômenos isolados através de modelos físicos simples. Estamos particularmente interessados na desnaturação térmica e nos modos de vibração de baixa frequência. Estes fenômenos são observados experimentalmente o que permite uma comparação direta entre teoria e experimento.

O estudo da desnaturação térmica no DNA também tem sido encarado como um passo preliminar no estudo de um dos principais fenômenos da Biologia Moderna: a transcrição do DNA. Na transcrição, embora seja um processo bastante complexo envolvendo inclusive outras macromoléculas, sabemos que ocorre uma desnaturação local do DNA.

Por outro lado, aos modos de baixa frequência tem-se atribuído importância em alguns processos, tais como intercalação de drogas e no processo de reconhecimento dos sítios gênicos<sup>(1)</sup>. Em intercalação de drogas pequenas às vibrações ao longo do DNA podem possibilitar a entrada da droga entre as duas fitas quando a amplitude de vibração permitir. Estas vibrações poderiam também sofrer, em determinadas regiões, interferências construtivas levando a um aumento da amplitude de oscilações capaz

de causar uma desnaturação local. Esta desnaturação local, além da importância na transcrição, pode possibilitar a intercalação de drogas grandes que de outra forma não poderiam entrar entre as duas fitas. Também pode permitir que ocorra processos bioquímicos, capazes de reconhecer o sítio gênico pois em determinados trechos do DNA as bases ficariam "livres" (sem as pontes de Hidrogénio que unem as fitas) e, portanto, em condições de reagir quimicamente com o meio.

No estudo teórico da desnaturação térmica e modos de baixa frequência atribuímos às pontes de Hidrogénio que une as duas fitas do DNA um papel fundamental. Desta forma, procuramos descrever estas pontes da melhor maneira possível. Para este fim usamos em primeiro lugar, o potencial de Morse e depois sugerimos um novo potencial para simular esta interação. Este novo potencial surge do uso de uma ferramenta matemática que foi gerada em Teoria de Campos. Esta ferramenta é a supersimetria.

A supersimetria surgiu em Teoria de Campos como uma simetria que gera transformações entre bósons e férmions. Ela junta estes dois tipos de partículas em um mesmo supermultiplete onde o gerador de supersimetria leva estados bosónicos em fermiónicos e vice-versa. Isto permite um tratamento unificado entre estas partículas. Foi mostrado, também, que estas teorias são menos divergentes, o que evita um grave problema das teorias de campos usuais. Em 1981, Witten<sup>(2)</sup> tratou a supersimetria em uma teoria em (1+0) dimensões introduzindo, assim, a Mecânica Quântica Supersimétrica. Esta versão da supersimetria tem sido usada com sucesso em vários problemas<sup>(3,4)</sup>. Vamos explorar o uso da superálgebra em um método de resolução da equação de Schrödinger e

para gerar novos potenciais exatamente solúveis.

Como meio para resolver a equação de Schrödinger a supersimetria fornece um método elegante que pode ser aplicado a todo potencial exatamente solúvel e à potenciais parcialmente solúveis, onde apenas parte do espectro é exato.

Outra aplicação da supersimetria em mecânica quântica permite gerar novos potenciais exatamente solúveis partindo de potenciais cujas soluções são conhecidas. Assim, potenciais como o oscilador harmónico, coulombiano, Posch-Teller entre outros podem ser usados como ponto de partida para gerar novos potenciais. As autofunções de um potencial gerado pela supersimetria estão relacionados às autofunções do potencial de partida e os espectros são idênticos. Como os espectros são iguais chegamos a uma questão delicada, a de como distinguir os potenciais. O estudo da desnaturação térmica do DNA indica um tipo de problema em que podemos fazer esta distinção, pois a forma da "função de onda" de uma equação tipo Schrödinger que surge do tratamento de um problema estatístico, via operador integral de transferência, é extremamente importante para caracterizar o fenómeno.

Quanto a estrutura da tese, o capítulo II fornece o tratamento teórico para estudar a desnaturação térmica e os modos de baixa frequência do DNA. No capítulo III, tratamos apenas a mecânica quântica supersimétrica e suas aplicações em resolver a equação de Schrödinger e gerar novos potenciais exatamente solúveis. O capítulo IV une os dois capítulos anteriores na medida em que introduz um novo potencial gerado pela supersimetria para simular as pontes de Hidrogénio no DNA e explorar as consequências

em termos dos resultados para a desnaturação térmica e modos de baixa frequência. Finalmente, no capítulo V são colocadas as conclusões gerais da tese.

Todo resultado numérico apresentado nesta tese foi obtido através do software Math Cad.

## CAPITULO II

### TRATAMENTO TEORICO PARA O DNA

## 1) PRELIMINARES

Vamos estudar dois efeitos que ocorrem no DNA: desnaturação térmica e modos de baixa frequência. Estes fenômenos são estudados experimentalmente, o que possibilita uma comparação direta entre teoria e experiência. Na desnaturação o formalismo que usamos tem origem no trabalho de Bishop e Peyrard<sup>(5)</sup>, enquanto para tratar os modos de baixa frequência usamos o modelo quase-contínuo<sup>(6)</sup>.

É importante mencionar que existem outras abordagens teóricas alternativas para tratar os fenômenos que estamos interessados em estudar. As ref. [7]-[9], por exemplo, apresentam formalismos diferentes do que usamos aqui para estudar os modos de baixa frequência enquanto a ref. [10] oferece um outro tratamento para a desnaturação.

Neste capítulo usamos o potencial de Morse<sup>(11)</sup> para simular as pontes de hidrogênio no DNA. Este potencial tem sido bastante empregado com este objetivo<sup>(5,10,12)</sup>. No final deste capítulo destacamos outros potenciais também usados para simular as pontes de hidrogênio.

O potencial de Morse possui algumas características que o torna particularmente interessante para o estudo que desenvolvemos neste capítulo. Primeiramente, este potencial tem sido usado para descrever as pontes de hidrogênio em outros contextos, como entre moléculas pequenas<sup>(13)</sup>. Outro aspecto importante é que este potencial possui solução exata da equação de Schrödinger. Além disso, a expansão em torno do mínimo estável aplicado ao modelo quase-contínuo permite obter alguns picos de

frequência que podem ser comparados aos dados experimentais. Finalmente, é interessante mencionar que o caráter não linear do potencial de Morse tem sido explorado na tentativa de introduzir excitações tipo sólitons na teoria<sup>(5,14)</sup>. A experiência tem sugerido a existência de tais excitações na molécula de DNA<sup>(15)</sup>.

## 11) DESNATURAÇÃO TÉRMICA

No estudo da desnaturação térmica<sup>(5)</sup> vamos assumir que o DNA é formado por duas fitas; cada uma consistindo de  $n$  massas (nucleotídeos) ligados entre si por molas (que simulam a interação de empilhamento), as fitas são unidas entre si por pontes de hidrogénio simuladas por um potencial  $V(y)$ .

A posição da  $n$ -ésima massa, que se desloca na direção das pontes de hidrogénio, é denotado por  $u_n$  e  $v_n$  para cada uma das fitas.

Considerando apenas o movimento uni-dimensional, ao longo das pontes de Hidrogénio, o sistema acima é descrito pelo hamiltoniano

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} m(\dot{u}_n^2 + \dot{v}_n^2) + \frac{1}{2} k \left[ (u_n - u_{n-1})^2 + (v_n - v_{n-1})^2 \right] + V(u_n - v_n) \right\}$$

II-1

Por simplicidade assumimos que a cadeia é homogénea (as massas  $m$  são idênticas) e que as constantes de mola  $k$  são iguais.

Introduzindo coordenadas normais

$$x_n = \frac{u_n + v_n}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad y_n = \frac{u_n - v_n}{\sqrt{2}} \quad \text{II-2}$$

o hamiltoniano (II-1) é reescrito

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} m (\dot{x}_n^2 + \dot{y}_n^2) + \frac{k}{2} \left[ (x_n - x_{n-1})^2 + (y_n - y_{n-1})^2 \right] + v(\sqrt{2} y_n) \right\} \quad \text{II-3}$$

Para uma cadeia contendo N segmentos podemos escrever a função partição clássica

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=1}^N dx_n dy_n dp_n dq_n e^{-\beta H} = Z_p Z_x Z_q Z_y \quad \text{II-4}$$

onde  $p_n = m\dot{x}_n$  e  $q_n = m\dot{y}_n$  são os momentos associados às coordenadas  $x_n$  e  $y_n$ . H é o hamiltoniano (II-3),  $\beta = 1/k_B T$  com  $k_B$  sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura. A estrutura do Hamiltoniano permite separar a função partição total em partes. A dependência na coordenada x e nos momentos p e q recaem numa integral gaussiana e são imediatamente calculadas:

$$Z_p = Z_q = \left( \frac{2\pi m}{\beta} \right)^{N/2} \quad e \quad Z_x = \left( \frac{2\pi}{\beta k} \right)^{N/2} \quad \text{II-5}$$

Entretanto,  $Z_y$  não possui uma forma simples e para determinar seu valor usamos o operador integral de transferência (apêndice B) que nos conduz a uma equação tipo Schrödinger

$$\left\{ -\frac{1}{\beta^2 k} \frac{d^2}{dy_n^2} + v(y_n) \right\} \Psi_i(y_n) = \left\{ \epsilon_i + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{2\pi}{\beta k} \right\} \psi_i(y_n) \quad \text{II-6}$$

Esta equação é analoga à equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao potencial  $V(y_n)$ .

Vamos usar o potencial de Morse para simular as

pontes de hidrogênio:

$$V(y) = D \left( 1 - e^{-\alpha y} \right)^2 \quad \text{II-7}$$

onde  $D = 0,33 \text{ eV}$  e  $\alpha = 1,8 \text{ \AA}^{-1}$  são os parâmetros do potencial<sup>(\*)</sup> que correspondem a valores médios para pontes tipo N-H...N e N-H...O entre os pares de base A-T e C-G. Este potencial, além de ser largamente usado com este propósito, possui solução exata da equação de Schrödinger. Assim, a equação (II-6) com o potencial de Morse (II-7) possui solução\* para o estado fundamental<sup>(5)</sup> dado por

$$\Psi_0(y) = (\alpha)^{1/2} \frac{(2d)^{d-1/2}}{\left[ \Gamma(2d-1) \right]^{1/2}} \left[ e^{-d} e^{-\alpha y} \right] \left[ e^{-(d-\frac{1}{2})\alpha y} \right] \quad \text{II-8}$$

e

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2\beta} \ln \left[ \frac{2\pi}{\beta k} \right] + \frac{\alpha}{\beta} \left[ \frac{D}{k} \right]^{1/2} - \frac{\alpha^2}{4\beta^2 k} \quad \text{II-9}$$

onde  $d = \frac{\beta}{\alpha} (k D)^{1/2}$ . Para  $d > \frac{1}{2}$  o espectro de (II-6) é discreto, ou seja, para  $d < \frac{1}{2}$  não existem estados ligados.

No limite de  $N$  muito grande o estado dominante é o de mais baixa energia  $\epsilon_0$ . Assim, o valor médio da distância entre as duas fitas  $\langle y \rangle$  é dado por

$$\langle y \rangle = \langle \Psi_0(y) | y | \Psi_0(y) \rangle = \int \left[ \Psi_0(y) \right]^2 y dy \quad \text{II-10}$$

---

(\*) Esta solução pode também ser encontrada através do método de fatoração descrito no Capítulo III.

Este valor é encontrado numericamente e mostrado na figura (II-1) com  $k = 3.0 \times 10^{-8} \text{ eV/\AA}^2$  que corresponde a curva que mais se aproxima do observado experimentalmente.

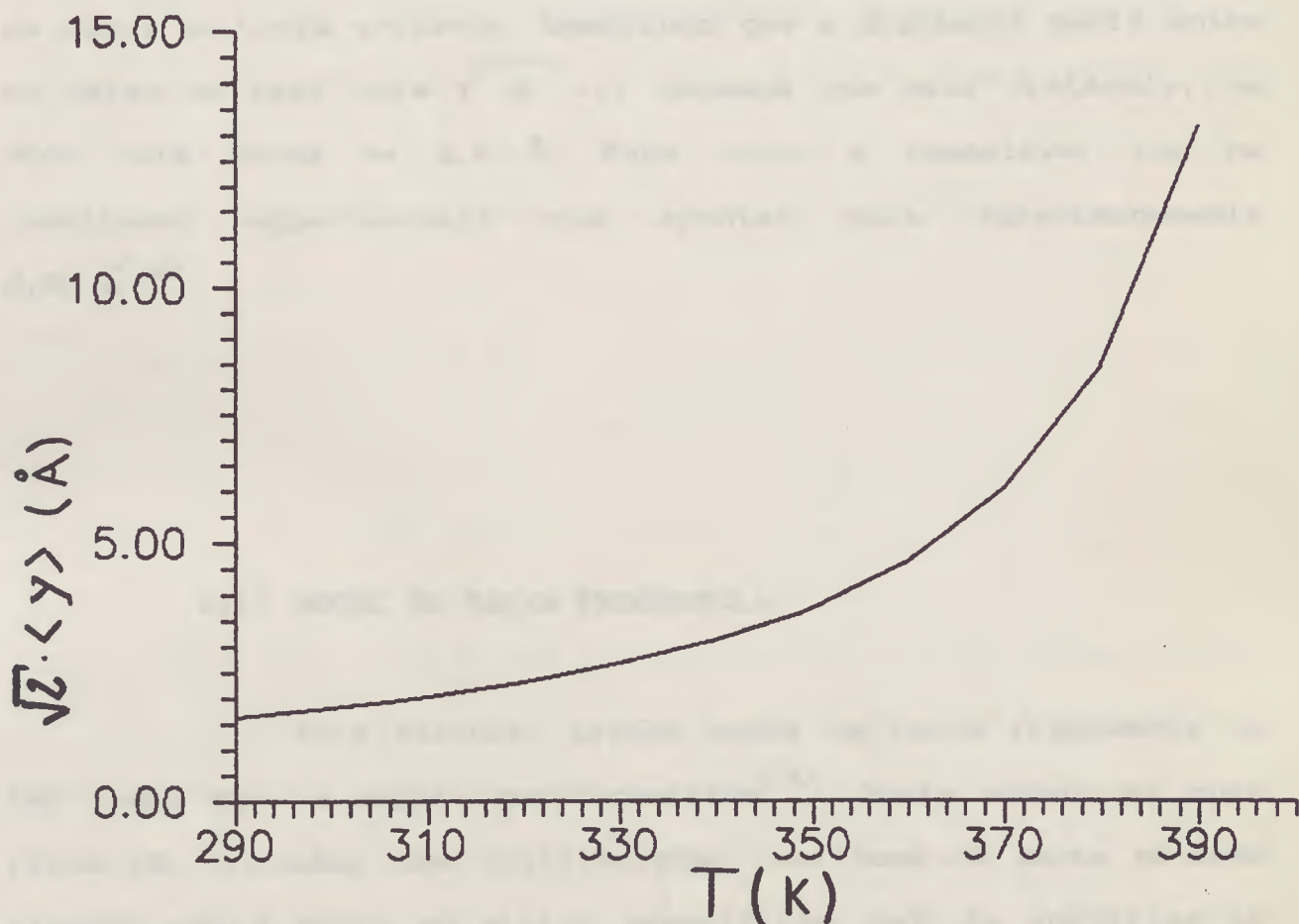


Figura II.1: Variação de  $\langle y \rangle$  em função da temperatura<sup>+</sup>.

---

(+) Esta figura difere do resultado apresentado na ref. [5]. Nesta referência há um erro computacional confirmado pelos autores em correspondência particular.

Analisando a fig. II.1 percebemos que a desnaturação começa a ocorrer por volta de 360 K (onde a inclinação da curva fica mais pronunciada) que é um valor coerente com o observado<sup>(16)</sup>. O critério para chegar a esta temperatura consiste em determinar no gráfico a região onde a não linearidade da curva se torna evidente. Lembrando que a distância média entre os pares de base vale  $\sqrt{2} \langle y \rangle$  obtemos que esta distância, em 300K vale cerca de 2,8 Å. Este valor é compatível com os resultados experimentais que apontam para aproximadamente 2,88 Å<sup>(16)</sup>.

### iii) MODOS DE BAIXA FREQUÊNCIA

Para calcular alguns modos de baixa frequência do DNA vamos usar o modelo quasi-contínuo<sup>(6)</sup>. Neste modelo as duas fitas são tratadas como distribuições contínuas de massa estando ligadas uma à outra em sítios específicos onde se localizam as pontes de Hidrogênio. Como estamos interessados em usar o modelo quase-contínuo, em baixas frequências podemos expandir o potencial de Morse (eq. II-7) próximo ao seu mínimo estável e utilizar apenas a aproximação harmônica:

$$v(y) \approx \frac{(2D \alpha^2)}{2} \cdot y^2 = \frac{k_M}{2} y^2 \quad \text{II-11}$$

Usando os mesmos parâmetros  $D$  e  $\alpha$  dados anteriormente obtemos

$$k_M = (2D \alpha^2) = 2,14 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2} = 3,43 \cdot 10^4 \text{ erg/m}^2.$$

No modelo quase-contínuo, primeiro, precisamos escrever a posição das fitas. Escolhendo a coordenada  $z$  ao longo do eixo de um cilindro imaginário em torno do qual enrola-se a dupla hélice escrevemos, em coordenadas cilíndricas:

<p>FITA 1</p> $r_1 = r$ $\phi_1 = \theta z + \alpha_1$ $z_1 = z$	<p>FITA 2</p> $r_2 = r$ $\phi_2 = \theta z + \alpha_2$ $z_2 = z$	$-\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}$	<p>II-12</p>
--	--	--	--------------

onde o valor de  $z$  é dado partindo do princípio que o segmento de DNA analisado tem comprimento  $L$  e o valor zero da coordenada  $z$  está no meio do cilindro. Nesta notação  $r$  é o raio do cilindro imaginário,  $\theta = \frac{2\pi}{H}$ , onde  $H$  é o passo da hélice, e  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são os ângulos de fase das fitas 1 e 2. O valor de  $|\alpha_2 - \alpha_1|$  é fixo e depende apenas da estrutura A-, B- ou Z-DNA considerada.

Dois tipos de oscilações são possíveis: (a) oscilações tipo torção na dupla hélice e (b) oscilações tipo alongamento da hélice em torno de  $\pm L/2$ . Vamos estudar estes dois tipos de movimento.

a) Oscilações Tipo Torção

Neste caso não há oscilações ao longo do eixo z. Assim, representando por u o deslocamento da fita, em termos de cada coordenada cilíndrica teremos

$$\begin{aligned} u_r &= u_r(z, t) \\ u_\phi &= u_\phi(z, t) \\ u_z &= 0 \end{aligned} \tag{II-13}$$

Assumindo que o maior ângulo de torção vale  $\lambda$  (em radianos), o deslocamento da componente  $\phi$  é dado por:

$$u_\phi(z, t) = \frac{2z\lambda}{L} \text{sen}(w \cdot t). \tag{II-14}$$

Desta forma a amplitude angular é maior nos extremos e zero no centro da dupla hélice, w é a frequência angular.

Por outro lado, a quantidade

$$S = \int ds = \int \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2} = \int_{-L/2}^{L/2} \sqrt{1+r^2\theta^2} dz = \sqrt{1+r^2\theta^2} L \tag{II-15}$$

é o comprimento absoluto de cada fita e é sempre constante. Para oscilações tipo torção temos também que L é constante ( $u_z = 0$ ) e a relação acima fornece  $r\theta = \text{cte}$  ou melhor:

$$r\theta L = r\Phi = \text{constante}, \tag{II-16}$$

onde  $\Phi = \theta L = \frac{2\pi}{H} L$  é o ângulo polar total medido entre os extremos da fita. Da relação II-16 segue

$$\Delta r \cdot \Phi + r \Delta \Phi = 0 \Rightarrow \Delta r = -r \frac{\Delta \Phi}{\Phi} \quad \text{II-17}$$

e

$$\Delta \Phi(t) = \int_{-L/2}^{L/2} du_{\phi} = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2\lambda}{L} \text{sen}(wt) dz = 2\lambda \text{sen}(wt) \quad \text{II-18}$$

Portanto, de II-17 e II-18 obtemos

$$\Delta r(t) = u_r(z, t) = -\frac{2\lambda r}{\Phi} \text{sen}(wt) \quad \text{II-19}$$

Observando as considerações acima o deslocamento da fita é dado por

$$u_r = -\frac{2\lambda r}{\Phi} \text{sen}(wt)$$

$$u_{\phi} = \frac{2z\lambda}{L} \text{sen}(wt) \quad \text{II-20}$$

$$u_z = 0$$

Para encontrar a frequência correspondente a este modo de vibração (tipo torção) vamos fazer uma comparação entre as energias cinética e potencial produzidas pela vibração.

A energia cinética máxima de um elemento de massa  $\rho \Delta z$  ( $\rho$  = densidade linear de massa) é dado por

$$\begin{aligned} \max (\Delta T_i) &= \frac{\rho \Delta z}{2} \max \left( \frac{du}{dt} \right)_i^2 = \frac{\rho \Delta z}{2} \max \left[ (r \dot{u}_\phi)^2 + \dot{u}_r^2 + \dot{u}_z^2 \right] = \\ &= \frac{\rho \Delta z}{2} \max \left\{ r^2 \left( \frac{2 z_i \lambda}{L} \cos wt \right)^2 + \left( \frac{2 \lambda r}{\phi} w \cos wt \right)^2 \right\} \end{aligned}$$

II-21

o máximo da energia cinética ocorre quando  $\cos(wt) = 1$ , ou seja

$$\max (\Delta T_i) = 2 \rho r^2 \lambda^2 w^2 \left\{ \frac{z_i^2}{L^2} + \frac{1}{\phi^2} \right\} \Delta z$$

II-22

Para toda fita:

$$\begin{aligned} \max T &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \left[ \sum_i \max (\Delta T_i) \right] = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2 \rho r^2 w^2 \lambda^2}{L^2} \left( z^2 + \frac{L^2}{\phi^2} \right) dz = \\ &= \frac{\rho r^2 w^2 \lambda^2 L}{6} \left\{ 1 + \frac{12}{\phi^2} \right\} \end{aligned}$$

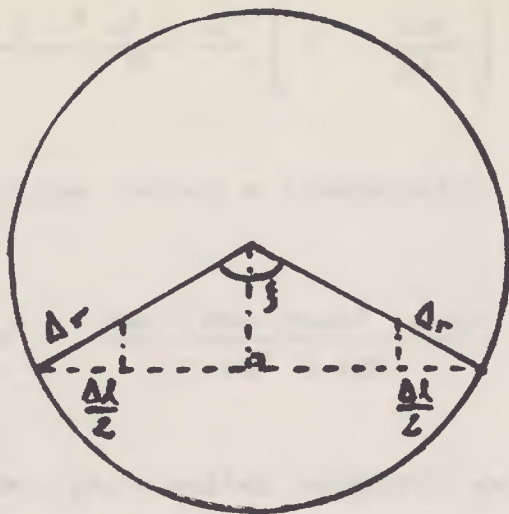
II-23

A energia potencial, por outro lado, terá um valor máximo quando o deslocamento for máximo (assumindo que seja zero na posição de equilíbrio):

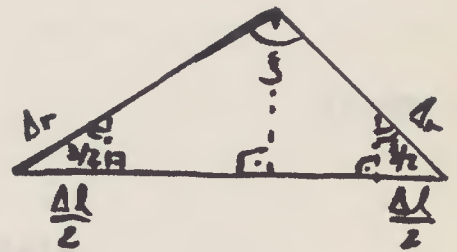
$$\max U = \frac{n (2D \alpha^2) [\max (\Delta l)]^2}{2}$$

II-24

onde  $(2D \alpha^2)$ , na aproximação que estamos usando, faz o papel da constante de mola e  $n$  é o número de pares de base ou sítios ligados. O valor máximo do deslocamento  $\Delta l$  pode ser encontrado da análise geométrica do que acontece a um par de base, como indicado na fig. II-2



(a)



(b)

Fig.II-2: a) Representação geométrica de 1 par de base inscrito no cilindro imaginário; b) Isolando o triângulo, visualizamos a relação entre os ângulos.

Analisando a fig. II-2 obtemos:

$$\text{máx}(\Delta D) = 2 \text{sen} \frac{\xi}{2} \text{máx}(\Delta r)$$

ou, considerando a eq. (II-19),

$$\text{máx}(\Delta D) = 4 \frac{\lambda \Gamma}{\xi} \text{sen} \frac{\xi}{2}, \quad \text{II-25}$$

onde  $\xi = |\alpha_2 - \alpha_1|$ . Com isso, o valor máximo da energia potencial se escreve

$$\text{máx } U = \frac{8n (2D \alpha^2) \text{sen}^2 (\xi/2) \Gamma^2 \lambda^2}{\xi^2} \quad \text{II-26}$$

Usando, agora, a conservação da energia ( $\text{máx } T = \text{máx } U$ ) e as energias dadas nas equações (II-23) e (II-26) obtemos:

$$\frac{\rho r^2 \omega^2 L \lambda^2}{6} \left[ 1 + \frac{12}{\Phi^2} \right] = \frac{8n (2D\alpha^2) \text{sen}^2 (\xi/2) r^2 \lambda^2}{\Phi^2} \quad \text{II-27}$$

o que conduz a frequência:

$$\omega^2 = \frac{48n (2D\alpha^2) \text{sen}^2 (\xi/2)}{\rho L (\Phi^2 + 12)} \quad \text{II-28}$$

ou, para melhor comparar com dados experimentais,

$$\tilde{\nu} = \frac{\omega}{2\pi c} = \frac{\text{sen} (\xi/2)}{\pi^2 c} g(n) \sqrt{\frac{3(2D\alpha^2)}{\langle m \rangle [1 + (3/\pi^2) g^2(n)]}} \quad \text{II-29}$$

sendo  $c$  a velocidade de luz no vácuo,  $\langle m \rangle = \frac{\rho L}{n} =$   
 $= \frac{\text{massa total do DNA}}{\text{no. de pares de base}}$  e  $g(n) = \frac{H}{L} = \frac{2\pi}{\Phi}$ .

#### b) Oscilações Tipo Alongamento

Neste tipo de oscilações temos:

$$u_\phi = 0 \quad \text{II-30}$$

pois não há torção.

Assumindo que o alongamento máximo dos dois extremos da dupla hélice é  $\gamma$ , o deslocamento ao longo do eixo  $z$  será:

$$u_z(z, t) = \frac{2z\gamma}{L} \text{sen}(\omega t) \quad \text{II-31}$$

Como não há torção devemos ter também que  $\Delta\phi = 0$ , i.é.  $\phi = \theta L = \text{constante}$ . Por outro lado, o comprimento absoluto da fita (II-15) também é constante:

$$S^2 = L^2 + r^2 \theta^2 L^2 = L^2 + r^2 \Phi^2 = \text{constante} \quad \text{II-32}$$

desta forma

$$L \Delta L + r \Delta r \Phi^2 = 0 \Rightarrow \Delta r = - \frac{L \Delta L}{r \Phi^2} \quad \text{II-33}$$

$\Delta L$ , por sua vez, é calculado por

$$\Delta L(t) = \int_{-L/2}^{L/2} d u_z = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2 \gamma}{L} \text{sen}(wt) dz = 2 \gamma \text{sen}(wt) \quad \text{II-34}$$

Finalmente, usando II-33 e II-34

$$\Delta r = u_r(z, t) = - \frac{2 \gamma L}{r \Phi^2} \text{sen}(wt) \quad \text{II-35}$$

Assim o deslocamento da fita é:

$$u_r = - \frac{2 \gamma L}{r \Phi^2} \text{sen}(wt)$$

$$u_\phi = 0 \quad \text{II-36}$$

$$u_z = \frac{2 \gamma z}{L} \text{sen}(wt)$$

Os valores máximos das energias cinética e potencial se escrevem, respectivamente, como:

$$\begin{aligned} \max. T &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \sum_i \frac{\rho \Delta z}{2} \max \left( \frac{du}{dt} \right)^2 = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{\rho}{2} \left\{ \left( \frac{du_r}{dt} \right)^2 + \left( \frac{du_z}{dt} \right)^2 \right\} dz \\ &= \frac{\rho \omega^2 \gamma^2 L}{6} \left\{ 1 + \frac{12 L^2}{r^2 \xi^4} \right\} \end{aligned} \quad \text{II-37}$$

$$\max U = \frac{n(2D\alpha^2) [\max(\Delta D)]^2}{2} = \frac{8n(2D\alpha^2) \text{sen}^2(\xi/2) L^2 \gamma^2}{r^2 \xi^4} \quad \text{II-38}$$

onde  $\max(\Delta D)$  é obtido de modo análogo ao anterior, eq. II-25.

Usando novamente a conservação da energia ( $\max T = \max U$ ) e as eqs. (II-37) e (II-38) obtemos

$$\omega^2 = \frac{48n(2D\alpha^2) \text{sen}(\xi/2) L}{\rho r^2 \xi^4 \left( 1 + \frac{12 L^2}{r^2 \xi^2} \right)} \quad \text{II-39}$$

ou

$$\tilde{\nu} = \frac{\omega}{2\pi c} = \frac{\text{sen}(\xi/2)}{\pi^3 c} \left( \frac{H}{2r} \right) \sqrt{\frac{3(2D\alpha^2)}{\langle m \rangle \left[ 1 + \left( \frac{H}{2r} \right)^2 \frac{3}{\pi^4} g^2(n) \right]}} g(n)$$

II-40

Usando os parâmetros citados no Apêndice C obtemos os valores das frequências que estão indicadas na tabela II-1.

n	A-DNA		B-DNA		Z-DNA	
	$\tilde{\nu}$ torção	$\tilde{\nu}$ along	$\tilde{\nu}$ torção	$\tilde{\nu}$ along	$\tilde{\nu}$ torção	$\tilde{\nu}$ along
6	43,6	25,5	39,2	32,2	42,3	39,8
8	37,1	20,8	32,9	25,0	36,4	33,6
10	31,8	17,0	28,0	20,3	31,5	28,7
12	27,7	14,3	24,2	17,1	27,6	24,9
15	23,0	11,6	20,0	13,8	23,1	20,7
18	19,6	9,7	17,0	11,5	19,7	17,6
24	15,0	7,3	13,0	8,7	15,2	13,5
38	9,7	4,6	8,3	5,5	9,8	8,6
50	7,4	3,5	6,3	4,2	7,5	6,6

Tabela II-1: Número de onda de movimentos tipo-torção e tipo-alongamento para A-DNA, B-DNA e Z-DNA ( $\tilde{\nu}$  dado em  $\text{cm}^{-1}$ ).

Estes resultados podem ser comparados aos valores dados por Chou et al<sup>(6)</sup>. Percebemos que nossos valores são sistematicamente maiores que os valores encontrados por aqueles autores para poly(Mix)<sub>n</sub>-DNA (que corresponde aos valores médios dos parâmetros que adotamos aqui), mas a relação entre eles não muda, os modos do tipo-torção tem sempre frequências maiores que o equivalente modo do tipo-alongamento.

A comparação com alguns dados experimentais revelam significativa concordância com os resultados apresentados acima. O estudo Raman feito por Lamba et al<sup>(17)</sup>, mostra um pico característico de baixa frequência em  $22 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$  para A-DNA poly (d(C-G)<sub>8</sub>) e um pico em  $18 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$  para B-DNA poly (d(MIX)<sub>12</sub>). Convém lembrar que um segmento poly(MIX) possui em média número de pares de base A-T igual ao número de pares C-G. Observamos na

tabela II-1 que para o B-DNA com 12 pares de base  $\tilde{\nu}_{\text{along}} = 17,1 \text{ cm}^{-1}$  e para o A-DNA com 8 pares de base  $\tilde{\nu}_{\text{along}} = 20,8 \text{ cm}^{-1}$  que concordam muito bem com os resultados experimentais. Dentro da nossa abordagem, não distinguimos segmentos homoligômeros (DNA formado apenas com um par de base) de segmentos não homoligômeros.

Outro resultado de espectroscopia Raman dado por Lindsay et al.<sup>(18)</sup>, aponta para uma banda de baixa frequência em  $12 \text{ cm}^{-1}$  para o B-DNA e a uma banda em  $15 \text{ cm}^{-1}$  para o A-DNA. Segundo o modelo quase-contínuo, estes modos devem ser vistos como modos dos segmentos intactos no DNA. Estes segmentos contêm em média 24 pares de base segundo C. Mandal et al.<sup>(19)</sup>. Assim na tabela II-1 obtemos para o B-DNA com  $n = 24$ ,  $\tilde{\nu}_{\text{torção}} = 13,0 \text{ cm}^{-1}$ , e para o A-DNA com  $n = 24$ ,  $\tilde{\nu}_{\text{torção}} = 15 \text{ cm}^{-1}$ , que estão em perfeita concordância com os dados experimentais citados acima.

Para o Z-DNA, entretanto Lamba et al.<sup>(17)</sup> determinam um modo de baixa frequência em  $30 \text{ cm}^{-1}$  para poli(G-C)<sub>n</sub> e pelos nossos resultados o valor que mais se aproxima é  $\tilde{\nu}_{\text{along}} = 39,8 \text{ cm}^{-1}$ . Esta discrepância pode ocorrer devido a dificuldade em fixar os parâmetros para o Z-DNA ou pelo fato de um segmento de DNA com somente 6 pares de base ser muito pequeno para ser tratado com este modelo simplificado.

No modelo quase-contínuo desprezamos o efeito da interação com a água. O efeito da água pode descaracterizar os picos de baixa frequência que calculamos. É bom frizar que dados experimentais que usamos aqui são relativos a cristais de DNA. Experimentalmente, temos, por exemplo, um pico observado em torno de  $25 \text{ cm}^{-1}$  que diminui com o aumento da unidade<sup>(20)</sup>.

Devemos também frizar que outros modelos teóricos também tem sido usados<sup>(7-9)</sup> para calcular os valores para os modos de baixa frequência, entretanto, a origem destes modos diferem. Usando o modelo quase-contínuo estamos atribuindo a origem dos modos que calculamos, principalmente às pontes de hidrogênio. O modo ao redor de  $12 \text{ cm}^{-1}$  para o B-DNA, por exemplo, é atribuído por Saxena et al<sup>(7)</sup> a vários fatores somados sendo o principal o movimento das duas bases vibrando como uma unidade rígida ao longo do eixo do DNA e não as pontes de hidrogênio como fazemos aqui. Experimentalmente, entretanto, não existem evidências sobre a verdadeira origem dos modos.

#### iv) COMENTÁRIOS

Os dois efeitos que estudamos teoricamente estão em bom acordo com os dados experimentais. Quanto a desnaturação, a fig. II.1 mostra uma curva em que a inclinação fica bem pronunciada em cerca de 360 K indicando este valor para o início da desnaturação, esta temperatura está de acordo com o que é indicado experimentalmente<sup>(10)</sup>. Por outro lado, os resultados expostos na tabela II-1 para os modos de baixa frequência coincide em vários valores com os dados experimentais como discutimos no final do item (iii) deste capítulo.

O modelo quase-contínuo pode também ser usado como um teste para os parâmetros propostos para descrever as pontes de hidrogênio no DNA, permitindo assim um possível critério para julgar estes parâmetros<sup>(21)</sup>. Assim, podemos dizer que os parâmetros  $D = 0,33 \text{ eV}$  e  $\alpha = 1.8 \text{ \AA}^{-1}$  que usamos são bons segundo o modelo quase-contínuo, pois nos levou a valores dos modos de baixa frequência próximo aos observados experimentalmente.

O potencial de Morse que usamos neste capítulo não é o único tipo de potencial proposto para descrever as pontes de Hidrogênio no DNA. Vários outros potenciais tem sido empregados para este fim. Destacamos dentre eles o potencial puramente harmônico<sup>(6)</sup>, o potencial tipo Leonard-Jones<sup>(22)</sup>:

$$V(y) = - \frac{A}{y^{10}} + \frac{B}{y^{12}},$$

e potencial proposto por Van Zandt<sup>(23)</sup>:

$$V(y) = \frac{\sigma}{42 \alpha^2} \left[ 1 - \frac{1 - 7 \alpha y}{(1 + \alpha y^7)} \right].$$

O potencial puramente harmônico, embora seja atraente pela sua simplicidade, possui limitações muito fortes tais como a dificuldade de caracterizar a desnaturação, pois o tamanho das pontes de Hidrogênio varia linearmente com a temperatura (vide Apêndice F); também fica difícil incluir excitações não-lineares no formalismo. O potencial tipo Leonard-Jones, embora bastante empregado por pesquisadores mais voltados para a química e também por aqueles que trabalham com dinâmica molecular, possui uma dificuldade de cálculo grande, por exemplo a equação tipo Schrödinger (eq. II-6) não é exatamente solúvel para este potencial. A mesma dificuldade encontramos no uso do potencial de

Van Zandt, embora este potencial possua uma forma tal que permite um maior entendimento dos parâmetros usados, por exemplo, o parâmetro  $\sigma$  é interpretado como a constante de mola quando expandimos o potencial ao redor do seu mínimo estável.

O uso de vários potenciais diferentes para simular as pontes de hidrogénio no DNA mostra a indefinição quanto ao melhor potencial a ser usado. No capítulo IV vamos introduzir um novo potencial, para tratar as pontes de Hidrogénio, que é originário do formalismo da mecânica quântica supersimétrica, e explorar sua aplicação.

## CAPÍTULO III

# MECÂNICA QUÂNTICA SUPER-SIMÉTRICA

Les auteurs ont également étudié les formes des courbes de  
distribution des probabilités et les effets des variations des  
paramètres sur les lois de répartition de ces courbes.  
Ces lois sont les lois de Poisson<sup>(1)</sup> et les lois binomiales<sup>(2)</sup>.

Il est intéressant de noter que les lois de Poisson et les lois binomiales  
sont des cas particuliers de la loi de répartition hypergéométrique.  
Ces lois sont les lois de Poisson<sup>(1)</sup> et les lois binomiales<sup>(2)</sup>.

### CAPITULO III

## MECANICA QUANTICA SUPERSIMETRICA

Les auteurs ont également étudié les formes des courbes de  
distribution des probabilités et les effets des variations des  
paramètres sur les lois de répartition de ces courbes.  
Ces lois sont les lois de Poisson<sup>(1)</sup> et les lois binomiales<sup>(2)</sup>.

## 1) PRELIMINARES

Do estudo de supersimetria em Teoria de Campo e (1+0) dimensões desenvolveu-se a mecânica quântica supersimétrica cujo formalismo tem tido aplicações em Física Atômica<sup>(24)</sup>, aproximação WKB<sup>(25)</sup> e em polímeros<sup>(26)</sup> entre outras.

Estamos particularmente interessados no método de resolução da equação de Schrödinger através da super-álgebra. Neste sentido, vamos introduzir o formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica e aplicá-lo na resolução da equação de Schrödinger com um potencial arbitrário. Depois, veremos como é possível encontrar novas classes de potenciais exatamente solúveis usando a supersimetria.

O formalismo será tratado de maneira direta, i.é., sem uma dedução de primeiros princípios. Uma abordagem deste tipo é encontrada, de maneira pedagógica, no texto de Ravndal<sup>(27)</sup>. Outros textos, como o original de Witten<sup>(2)</sup>, o de Cooper e Freedman<sup>(28)</sup> e o de Gedenshtein e Krive<sup>(9)</sup>, também podem ser de interesse.

## 11) FORMALISMO

A Mecânica Quântica Supersimétrica (N=2) pode ser descrita em termos do Hamiltoniano em (1+0) dimensões<sup>(29)</sup>

$$\mathcal{H}_{\text{ss}} = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) - [\Psi^+, \Psi] \frac{dW(x)}{dx} \quad \text{III-1}$$

onde  $x$  e  $i \frac{d}{dx}$  são os operadores bosônicos, enquanto  $\Psi$  e  $\Psi^+$  são operadores fermiônicos. Estes operadores satisfazem as seguintes relações de comutação (indicada por colchetes) e anticomutação (indicada por chaves):

$$[p, x] = -i, [x, x] = [p, p] = 0 \quad \text{III-2}$$

$$\{\Psi, \Psi^+\} = 1, \quad \Psi^2 = \Psi^{+2} = 0 \quad \text{III-3}$$

A algebra supersimétrica é gerada a partir dos operadores nilpotentes

$$Q^+ = \left\{ -\frac{d}{dx} + W(x) \right\} \Psi^+ \equiv d^+ \Psi^+ \quad \text{III-4}$$

$$Q = \left\{ \frac{d}{dx} + W(x) \right\} \Psi \equiv d^- \Psi \quad \text{III-5}$$

que satisfazem as relações

$$\{Q, Q^+\} = \mathcal{X}_{\dots} \quad \text{III-6}$$

$$[\mathcal{X}_{\dots}, Q] = [\mathcal{X}_{\dots}, Q^+] = 0 \quad \text{III-7}$$

$$Q^2 = Q^{+2} = 0 \quad \text{III-8}$$

Para o caso do oscilador harmônico os operadores  $Q$  e  $Q^+$  possuem uma interpretação imediata.  $Q^+$  destrói um estado bosônico e cria um estado fermiônico, enquanto  $Q$  atua de maneira oposta.

A algebra (III-6 - III-8) pode ser realizada escolhendo-se uma forma matricial para os operadores fermiônicos:

$$\Psi = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Psi^+ = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{III-9}$$

Notamos que (III-3) é satisfeita e que

$$-\left[ \Psi^+, \Psi \right] = + \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad \text{III-10}$$

Com esta realização o hamiltoniano supersimétrico (III-6) assume a forma

$$\mathcal{H}_{ss} = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) - \sigma_3 \frac{dW(x)}{dx} = \begin{bmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{bmatrix} \quad \text{III-11}$$

onde  $H_+$  e  $H_-$  são chamados de companheiros supersimétricos e  $W(x)$  é o superpotencial. Equivalentemente podemos escrever:

$$\mathcal{H}_{ss} = \begin{bmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d^+ d^- & 0 \\ 0 & d^- d^+ \end{bmatrix} \quad \text{III-12}$$

Com os operadores  $d^+$  e  $d^-$  extraídos das eq. III-4 e III-5.

As auto-funções de  $\mathcal{H}_{ss}$  serão, nesta representação, vetores de duas componentes:

$$\Psi_{ss} = \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix} \quad \text{III-13}$$

e a ação dos geradores  $Q$  e  $Q^+$  nestas auto funções é

$$Q \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ d^- \Psi_+ \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad Q^+ \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d^+ \Psi_- \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{III-14}$$

isto indica que  $Q$  e  $Q^+$  induzem transformações entre o setor "bosônico" ( $\Psi_+$ ) e o setor "fermiônico" ( $\Psi_-$ ), e ainda que as auto funções de  $H_-$  podem ser escritas em termos das auto funções de

$H_+(\Psi_- \propto d^-\Psi_+)$  e vice-versa ( $\Psi_+ \propto d^+\Psi_-$ ). Este fato pode ser facilmente verificado seguindo o tratamento algébrico dado abaixo.

Observamos que:

$$H_+ \Psi_+ = E \Psi_+$$

multiplicando os dois lados pelo operador  $d^-$ :

$$d^- H_+ \Psi_+ = d^- E \Psi_+ \rightarrow d^- d^+ d^- \Psi_+ = E d^- \Psi_+ \rightarrow H_- d^- \Psi_+ = E d^- \Psi_+$$

como:

$$H_- \Psi_- = E \Psi_-$$

concluimos que

$$d^- \Psi_+ \propto \Psi_-$$

III-15

Um procedimento análogo nos leva a  $\Psi_+ \propto d^+ \Psi_-$ .

Quanto aos auto valores de energia, sabemos que eles devem ser os mesmos para  $H_+$  e  $H_-$ . Este fato é um resultado direto do fato de  $\mathcal{X}_{\pm}$  comutar com  $Q$  e  $Q^+$ . Entretanto, devemos tomar especial cuidado com o estado fundamental. Para  $E = 0$  devemos ter:

$$d^- \Psi_{+,0} = \left\{ \frac{d}{dx} + W(x) \right\} \Psi_{+,0} = 0 \rightarrow \Psi_{+,0} \propto e^{-\int_0^x W(\bar{x}) d\bar{x}} \quad \text{III-16}$$

e

$$d^+ \Psi_{-,0} = \left\{ \frac{d}{dx} + W(x) \right\} \Psi_{-,0} = 0 \rightarrow \Psi_{-,0} \propto e^{+\int_0^x W(\bar{x}) d\bar{x}} \quad \text{III-17}$$

obviamente  $\Psi_{-,0}$  e  $\Psi_{+,0}$  não podem ser ambos normalizados para uma mesma função  $W(x)$ . Desta forma escolhemos um dos setores de  $\mathcal{X}_{\pm}$  como tendo o estado fundamental normalizado, por exemplo  $\Psi_{+,0}(x)$ . Assim, podemos concluir que o espectro de  $H_+$  e  $H_-$  são idênticos, exceto pelo estado fundamental.

### iii) USANDO SUPERSIMETRIA PARA RESOLVER A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

O uso da super-álgebra na solução da equação de Schrödinger foi introduzido por Gendenstein<sup>(30)</sup> em problemas exatamente solúveis e aparece como uma consequência da existência de uma família de hamiltoniano ligados entre si pela supersimetria<sup>(31)</sup>. Recentemente, potenciais parcialmente solúveis também tem sido tratados por este método<sup>(32,33)</sup>.

Partindo de um hamiltoniano  $H_1$  cujo estado fundamental vale  $E_1^{(0)}$  podemos escrever

$$H_1 = d_1^+ d_1^- + E_1^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad \text{III-18}$$

Usando operadores  $d_1^\pm$  extraídos de (III-4) e (III-5):

$$d_1^\pm = \mp \frac{d}{dx} + W_1(x) \quad \text{III-19}$$

em (III-18) obtemos a equação de Ricatti

$$W_1^2 - W_1' + E_1^{(0)} = V_1(x) \quad \text{III-20}$$

onde  $W_1$  fornece a autofunção do estado fundamental (eq. III-15)

$$\Psi_1^{(0)}(x) = e^{-\int_0^x W_1(\bar{x}) d\bar{x}} \quad \text{III-21}$$

O companheiro supersimétrico de  $H_1$  é dado por

$$H_2 = d_1^- d_1^+ + E_1^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad \text{III-22}$$

onde

$$V_2(x) = V_1(x) + [d_1^+, d_1^-] = V_1(x) - W_1'(x) \quad \text{III-23}$$

Através da superálgebra sabemos que

$$E_2^{(n)} = E_2^{(n+1)} \quad \text{III-24}$$

$$\Psi_1^{(n+1)} = d_1^+ \Psi_2^{(n)} \quad \text{III-25}$$

Estas expressões refletem a igualdade do espectro (a menos do estado fundamental) e a mudança do setor "bosônico" para o setor "fermiônico" (eq. III-15) discutidas anteriormente.

Podemos agora tentar fatorar  $H_2$  em termos de seu estado fundamental  $(\Psi_2^{(0)}, E_2^{(0)})$ .

$$H_2 = d_2^+ d_2^- + E_2^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad \text{III-26}$$

onde

$$d_2^\pm = \mp \frac{d}{dx} + W_2(x) \quad \text{III-27}$$

e obtemos

$$W_2^2 - W_2' + E_2^{(0)} = V_2(x) \quad \text{III-28}$$

O novo companheiro supersimétrico de  $H_2$  é dado por

$$H_2 = d_2^- d_2^+ + E_2^{(0)} \equiv -d^2/dx^2 + V_2(x) \quad \text{III-29}$$

o qual também fatoramos

$$H_2 = d_2^+ d_2^- + E_2^{(0)} \quad \text{III-30}$$

e sabemos que

$$E_2^{(n)} = E_2^{(n+1)} \quad \text{III-31}$$

$$\Psi_2^{(n+1)} = d_2^+ \Psi_2^{(n)} \quad \text{III-32}$$

Este processo de construção de hamiltonianos pode ser repetido n vezes o que permite escrever

$$H_n = d_n^- d_n^+ + E_n^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_n(x) \quad \text{III-33}$$

com

$$d_n^\pm = \mp \frac{d}{dx} + W_n(x) \quad \text{III-34}$$

$$\Psi_n^{(0)}(x) = N e^{-\int_0^x W_n(\bar{x}) d\bar{x}} \quad \text{III-35}$$

Pela álgebra da mecânica quântica supersimétrica a solução deste n-ésimo hamiltoniano está relacionada com a solução de  $H_1$ :

$$\Psi_1^{(n)} = d_1^+ d_2^+ \dots d_n^+ \Psi_{n+1}^{(0)} \quad \text{III-36}$$

$$E_1^{(n)} = E_{n+1}^{(0)} \quad \text{III-37}$$

Assim, construímos uma família de hamiltonianos  $(H_1, H_2 \dots H_n)$  onde todos os membros estão relacionados entre si através da supersimetria. Entretanto, dentre todos os potenciais  $V_1(x)$  possíveis, apenas uma classe deles permite tal construção.

Os potenciais com invariância na forma funcional são exemplos de potenciais com os quais podemos construir as famílias supersimétricas. A invariância na forma significa que o potencial  $V_2$  tem a mesma forma funcional de  $V_1$ , porém com

parâmetros diferentes (incluindo constante aditiva)<sup>(30)</sup>.

A estrutura das super-famílias nos permite desenvolver um método para resolver a equação de Schödinger. Partindo de um hamiltoniano original extraímos a energia e a auto função da equação de Ricatti (III-20) e para cada membro da super-família temos uma equação semelhante. Determinamos as energias e autofunções do estado fundamental para todos os hamiltonianos e através das relações (III-36) e (III-37) solucionamos o problema original. Os potenciais de "forma invariante", portanto, são todos exatamente solúveis. Como ilustração deste método vamos tratar o oscilador harmônico.

O hamiltoniano do oscilador harmônico uni-dimensional é

$$H_1 = - \frac{d^2}{dx^2} + w^2 x^2 \quad \text{III-38}$$

e pode ser fatorado pelos operadores

$$d_1^\pm = \mp \frac{d}{dx} + w x \quad \text{III-39}$$

O primeiro hamiltoniano da super-família é

$$H_1 = d_1^+ d_1^- + E_1^{(0)} = - \frac{d^2}{dx^2} + w^2 x^2 - w + E_1^{(0)} \quad \text{III-40}$$

Notemos que  $W(x) = + wx$  e  $E_1^{(0)} = w$  satisfazem a equação de Ricatti (III-20) com  $V_1(x) = w^2 x^2$ .

Seguindo nossa construção determinamos

$$H_2 = d_1^- d_1^+ + E_1^{(0)} = - \frac{d^2}{dx^2} + w^2 x^2 + 2w \quad \text{III-41}$$

que pode ser fatorado por

$$d_2^\pm = \mp \frac{d}{dx} + wx \quad \text{III-42}$$

Assim

$$H_2 \equiv d_2^+ d_2^- + E_2^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w^2 x^2 - w + E_2^{(0)} \quad \text{III-43}$$

Comparando III-41 com III-43 obtemos  $E_2^{(0)} = 3w$ . O próximo Hamiltoniano será:

$$H_3 = d_2^- d_2^+ + E_2^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w^2 x^2 + 4w \quad \text{III-44}$$

que por sua vez é fatorado por:

$$d_3^\pm = \mp \frac{d}{dx} + wx \quad \text{III-45}$$

ou seja

$$H_3 \equiv d_3^+ d_3^- + E_3^{(0)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w^2 x^2 - w + E_3^{(0)} \quad \text{III-46}$$

Comparando III-44 e III-46 obtemos  $E_3^{(0)} = 5w$ .

Este processo pode ser repetido. Verificamos que para o caso geral

$$d_n^\pm = \mp \frac{d}{dx} + wx \quad \text{III-47}$$

$$E_1^{(n)} = E_{n+1}^{(0)} = (2n + 1) w \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad \text{III-48}$$

O oscilador harmônico é um exemplo em que o superpotencial é idêntico para todos os membros da super-família:  $W(x) = wx$ . Assim, as autofunções são dadas por

$$\Psi_1^{(n)} = d_1^+ \dots d_n^+ \Psi_{n+1}^{(0)} = \left[ -\frac{d}{dx} + wx \right]^n e^{-w \frac{x^2}{2}} \quad \text{III-49}$$

Um caso mais complexo é o oscilador harmônico com barreira de potencial cujo hamiltoniano pode ser escrito

$$H_1 = - \frac{d^2}{dr^2} + w^2 r^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \quad \text{III-50}$$

Usando a super-algebra e construindo a família de hamiltoniano obtemos:

$$d_n^+ = \frac{d}{dr} + wr - \frac{\ell+1+n}{r} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{III-51}$$

$$E_n = w(2\ell + 4n + 3) = w(2N + 1) \quad \text{III-52}$$

onde  $N = 2n + \ell + 1$  e  $W(r) = wr - \frac{\ell + 1 + n}{r}$ . A função de onda do n-ésimo estado fundamental é

$$\Psi_n^{(0)} = e^{-\frac{wr^2}{2}} r^{(\ell+1+n)} \quad \text{III-53}$$

Assim, as autofunções do problema original são

$$\Psi_1^{(n)} = d_1^+ \dots d_n^+ \Psi_{n+1}^{(0)} = d_1^+ \dots d_n^+ e^{-\frac{wr^2}{2}} r^{(\ell+1+n)} \quad \text{III-54}$$

com  $d_n^+$  dado em (III-51). As equações (III-52) e (III-54) fornecem o espectro e autofunções, respectivamente, para o hamiltoniano do oscilador harmônico tri-dimensional (III-50).

Este método de resolução da equação de Schrödinger pode também ser aplicado a problemas parcialmente solúveis, ié, quando apenas alguns estados são analíticos. Neste caso o potencial não é de "forma invariante". Um exemplo é o potencial

não-polinomial<sup>(32)</sup>

$$V(x) = x^2 + \lambda \frac{x^2}{1 + gx^2} \quad \text{III-55}$$

onde apenas dois estados são analíticos quando  $g$  e  $\lambda$  são fixados de maneira conveniente. Assim, com  $g = \frac{2}{3}$  e  $\lambda = -\frac{16}{3}$  obtemos:

$$W_1 = -x + \frac{1}{x} + \frac{2gx}{1+gx^2} \quad \text{III-56}$$

$$W_2 = -x - \frac{1}{x} + \frac{4gx}{1+gx^2} \quad \text{III-57}$$

o que implica em

$$\Psi_1^{(0)} = x \left[ 1 + \frac{2}{3} x^2 \right]^2 e^{-x^2/2} \quad \text{III-58}$$

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(1)} = d_1^+ \Psi_2^{(0)} &= \left\{ -\frac{d}{dx} + W_2 \right\} \frac{1}{x} \left[ 1 + \frac{2}{3} x^2 \right]^2 e^{-x^2/2} = \\ &= \left[ 1 - \frac{2}{3} x^2 \right] \left[ 1 + \frac{2}{3} x^2 \right] e^{-x^2/2} \quad \text{III-59} \end{aligned}$$

Também obtemos os auto valores da energia

$$E_1^{(0)} = -1/2 \quad \text{e} \quad E_1^{(1)} = E_1^{(0)} = 1/2 \quad \text{III-60}$$

Outros pares de estados também podem ser determinados para outros valores de  $g$  e  $\lambda$ . Uma útil relação entre a parcial algebrização do problema espectral<sup>(34)</sup> e supersimetria fornece o número de estados que podem ser calculados analiticamente<sup>(35)</sup>.

## 1v) ENCONTRANDO NOVOS POTENCIAIS EXATAMENTE SOLÚVEIS ATRAVÉS DA SUPERSIMETRIA

O procedimento descrito neste ítem tem origem no método de fatorização do hamiltoniano descrito por Mielnik<sup>(36)</sup> para o oscilador harmónico uni-dimensional e posteriormente aplicado a outros potenciais<sup>(37,38)</sup>. O carácter supersimétrico embutido neste formalismo foi explorado por Nieto<sup>(39)</sup> e Alves e Drigo Filho<sup>(40)</sup>.

Como vimos a parte bosónica dos geradores de supersimetria é escrita

$$d^{\pm} = \mp \frac{d}{dx} + W(x) \quad \text{III-61}$$

o que nos leva a um hamiltoniano dado por (III-11).

Entretanto, podemos construir novos operadores generalizando  $d^{\pm}$ ;

$$D^{\pm} = \mp \frac{d}{dx} + F(x) \quad \text{III-62}$$

onde  $F(x)$  é uma generalização do superpotencial  $W(x)$  e é encontrado quando impomos que

$$H_- = D^- D^+ \quad \text{III-63}$$

ié, que o companheiro supersimétrico de  $H_+$  seja fatorado pelos novos operadores. Esta igualdade leva a seguinte equação de Ricatti

$$F^2(x) + \frac{d}{dx} F(x) = W^2(x) + \frac{d}{dx} W(x) \quad \text{III-64}$$

Obviamente,  $F(x) = W(x)$  é uma solução particular da equação acima, porém outra solução mais geral pode ser encontrada. O comutador dos novos geradores é

$$\left[ D^-, D^+ \right] = 2 \frac{d}{dx} F(x) \quad \text{III-65}$$

que permite definir um novo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_+ = D^+ D^- = D^- D^+ - \left[ D^-, D^+ \right] = D^- D^+ - 2 \frac{d}{dx} F(x) \quad \text{III-66}$$

cujo potencial é diferente do potencial de  $H_+$  e de  $H_-$ . Contudo, pela super-algebra, sabemos que o espectro de  $\mathcal{H}_+$  é o mesmo de  $H_-$  e as autofunções de  $\mathcal{H}_+$  são dadas por

$$\Psi_+ = D^+ \Psi_- = D^+ d^- \Psi_+ \quad \text{III-67}$$

Este mapeamento entre autofunções não é completo, pois exclue o estado fundamental de  $\mathcal{H}_+$ , que pode ser obtido pela equação:

$$D^- \Psi_{+,0} = 0 \quad \text{III-68}$$

Seguindo esta construção podemos determinar novos potenciais partindo de um potencial exatamente solúvel. O espectro e as autofunções destes novos potenciais são determinados através da solução do potencial original.

Vamos ilustrar o procedimento descrito acima encontrando a "generalização supersimétrica" do oscilador harmônico uni-dimensional. O hamiltoniano de partida neste caso é

$$H_+ = - \frac{d^2}{dx^2} + x^2 - 1 \quad \text{III-69}$$

que é fatorado pelos operadores:

$$d^{\pm} = \mp \frac{d}{dx} + x \quad \text{III-70}$$

Análogos aos operadores (III-39) com  $w = 1$ . O fator  $(-1)$  é introduzido em (III-69) para deslocar o espectro de forma que o estado fundamental tenha autovalor nulo. O companheiro supersimétrico de  $H_+$   $= d^+ d^-$  é

$$H_- = d^- d^+ = - \frac{d^2}{dx^2} + x^2 + 1 \quad \text{III-71}$$

Definindo os novos operadores  $D^{\pm}$  dados em (III-62) e impondo  $H_- = D^- D^+$  chegamos a seguinte equação de Ricatti (eq. (III-64))

$$F^2(x) + \frac{dF}{dx}(x) = x^2 + 1 \quad \text{III-72}$$

Uma solução particular desta equação é  $F(x) = W(x) = x$ . A solução geral é  $F(x) = x + \phi(x)$  que é a solução particular somada a solução da equação não homogênea

$$\phi^2(x) + 2x \phi(x) + \phi'(x) = 0 \quad \text{III-73}$$

Esta igualdade é obtida substituindo a solução geral de  $F(x)$  em (III-72). Dividindo (III-73) por  $\phi^2(x)$  e chamando  $Y(x) = \frac{1}{\phi(x)}$

obtemos

$$Y'(x) - 2x Y(x) - 1 = 0 \quad \text{III-74}$$

O valor de  $Y(x)$  é encontrado resolvendo a equação homogênea:

$$Y_H'(x) - 2x Y_H(x) = 0 \quad \text{III-75}$$

que nos leva

$$Y_H = N e^{x^2} \quad \text{III-76}$$

Fazendo a constante  $N$  dependente da variável  $x$  e voltando a (III-73) obtemos a solução

$$N(x) = \Gamma + \int_0^x e^{-z^2} dz$$

onde  $\Gamma$  é uma constante de integração. Assim a solução de (III-73) é

$$\phi(x) = \frac{e^{-x^2}}{\Gamma + \int_0^x e^{-z^2} dz} \quad \text{III-77}$$

limitamos  $\Gamma$  a valores maiores que zero e menores que  $\left[-\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right]$  para evitar singularidades. Os novos operadores valem

$$D^\pm = \mp \frac{d}{dx} + x - \phi(x) \quad \text{III-78}$$

O novo hamiltoniano, construído conforme eq. (III-66) é:

$$\mathcal{H}_+ = D^+ D^- = D^- D^+ - 2 \frac{d}{dx} \phi(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - 1 - 2 \frac{d}{dx} \phi(x) \quad \text{III-79}$$

Pela superálgebra, sabemos que o espectro de  $\mathcal{H}_+$  é o mesmo do oscilador harmônico e suas auto-funções são dadas por (III-67) onde  $\Psi_+$  são as auto-funções do oscilador harmônico uni-dimensional. O estado fundamental, perdido neste mapeamento

entre auto-funções, é dado por (III-68) e neste caso vale:

$$D^- \psi_{+,0} = \left\{ \frac{d}{dx} + x - \phi(x) \right\} \psi_{+,0} = 0 \Rightarrow \psi_{+,0} = e^{-x^2 + \int_0^x \phi(z) dz}$$

III-80

Assim, o novo hamiltoniano (III-70) é resolvido analiticamente, ou seja, determinamos todo seu espectro e suas autofunções.

Outros potenciais exatamente solúveis como o de Morse<sup>(41)</sup>, partícula em uma caixa, Poshl-Teller, Rosen-Morse<sup>(42)</sup>, oscilador harmônico e Coulombiano em dimensões arbitrárias<sup>(40)</sup> foram generalizados através deste método, alargando assim o número restrito de potenciais quânticos exatamente solúveis.

#### v) COMENTÁRIOS

As duas aplicações de supersimetria em mecânica quântica que estudamos mostram, em parte, o interesse existente por este formalismo.

Na resolução da equação de Schrödinger propriamente dita existe um grande interesse na solução de sistemas parcialmente solúveis e a sua conexão com a chamada algebrização parcial do problema espectral<sup>(43)</sup>.

A construção de novos potenciais exatamente solúveis é de particular interesse para nós. Como os novos potenciais possuem espectros idênticos aos dos potenciais originais não se tem encontrado sistemas físicos em que eles possam ser usados e distinguidos dos potenciais originais. Entretanto, as funções de ondas resultante dos diferentes potenciais não são as mesmas, portanto, em efeitos onde a forma da

função de onda é importante devemos observar diferenças entre os potenciais originais e novos. Neste sentido vamos usar a generalização do oscilador harmônico para estudar as pontes de hidrogênio no DNA. Como vimos no capítulo II a desnaturação térmica do DNA pode ser percebida através do comportamento da distância média entre pares de base,  $\langle y \rangle$ , em função da temperatura. Por sua vez os valores de  $\langle y \rangle$  podem ser extraídos de uma equação tipo Schrödinger e depende essencialmente da forma da função de onda. Podemos concluir, então, que obteremos resultados diferentes se usamos o potencial original ou a sua generalização.

## CAPITULO IV

### NOVO POTENCIAL PARA SIMULAR AS PONTES DE HIDROGENIO AO DNA

## 1) PRELIMINARES

Analisando a desnaturação térmica e os modos de baixa frequência propomos um potencial alternativo para simular as pontes de Hidrogênio no DNA. Este potencial surge da aplicação da superálgebra para generalizar o potencial harmônico uni-dimensional. A equação de Schrödinger usual em mecânica quântica é substituída por uma equação similar que reflete o caráter estatístico do problema. Este caráter, no presente estudo é essencialmente clássico, a equação tipo Schrödinger que usamos é resultado direto da aplicação da técnica do operador integral transferência desenvolvida no capítulo II.

Podemos refletir sobre o tratamento feito neste capítulo sob dois pontos de vista diferentes. Primeiro, podemos encarar o problema Biofísico. Neste caso, sabemos da importância das pontes de Hidrogênio na estabilidade da dupla hélice do DNA e o novo potencial pode contribuir para uma melhor compreensão, pelo menos a nível teórico, dos processos onde as pontes são relevantes. Sob outro aspecto, podemos olhar para nossos resultados sob o prisma da Teoria de Campos ou Física Matemática. Por este lado, é muito interessante atribuir a um sistema físico real um potencial gerado através da álgebra supersimétrica e analisar um efeito (desnaturação térmica) onde a forma da função de onda é fundamental, determinando um parâmetro físico. Convém lembrar que a forma da função de onda distingue os potenciais original e generalizado uma vez que os espectros são idênticos.

Uma comparação entre os resultados para o potencial harmônico e para potencial proposto é explicitado no tratamento da desnaturação térmica. Esta comparação visa tornar claro a diferença entre ambos os potenciais. Fazemos também uma comparação com os resultados obtidos com o uso do potencial de Morse.

## 11) NOVO POTENCIAL

No capítulo II tratamos um problema estatístico, no caso a desnaturação térmica do DNA, resolvendo uma equação tipo Schrödinger:

$$\left\{ -\frac{1}{\beta^2 k} \frac{d^2}{dy_n^2} + V(y_n) \right\} \psi_i(y_n) = \left\{ \epsilon_i + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{2\pi}{\beta k} \right\} \psi_i(y_n) \quad \text{IV-1}$$

onde  $y_n$  representa a distância entre o par de base  $n$ , os outros parâmetros são os mesmos definidos no capítulo II e  $V(y_n)$  é o potencial que simula as pontes de Hidrogênio.

Algumas observações sobre a equação acima devem ser consideradas. Em primeiro lugar, é importante saber a forma analítica de  $\psi_0(y_n)$  para determinar os valores de  $\langle y \rangle$  em função da temperatura. Outro ponto, é que podemos usar um potencial não harmônico que permita posteriormente incluir efeitos não lineares. Conjectura-se que tais efeitos possam ter papel importante na dinâmica do DNA<sup>(15)</sup>. O processo de construção de novos potenciais estudado no capítulo III permite obter um potencial que apresenta estas características.

Vamos partir do potencial harmônico e escrever um "hamiltoniano"

$$H_+ = - \frac{1}{\beta^2 k} \frac{d^2}{dy^2} + ay^2 - \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}} \quad \text{IV-2}$$

que pode ser fatorado por:

$$a^\pm = \frac{1}{\sqrt{k} \beta} \left\{ \mp \frac{d}{dy} + \sqrt{ak} \beta y \right\} \quad \text{IV-3}$$

Portanto, o companheiro supersimétrico de  $H_+ = a^+ a^-$  será:

$$H_- = a^- a^+ = - \frac{1}{k\beta^2} \frac{d^2}{dy^2} + ay^2 + \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}} \quad \text{IV-4}$$

Para generalizar o potencial inicial (IV-2) definimos novos operadores:

$$A^\pm = \frac{1}{\sqrt{k} \beta} \left\{ \mp \frac{d}{dy} + f(y) \right\} \quad \text{IV-5}$$

e impomos que

$$H_- \equiv A^+ A^- \quad \text{IV-6}$$

Desta igualdade obtemos (mostrado no apêndice D) que

$$f(y) = \sqrt{ak} \beta y + \phi(y) \quad \text{IV-7}$$

com

$$\phi(y) = \frac{e^{-\sqrt{ak} \beta y^2}}{\Gamma + \int_0^y e^{-\sqrt{ak} \beta \bar{y}^2} d\bar{y}} \quad \text{IV-8}$$

E o novo potencial vale

$$V(y) = ay^2 - \frac{1}{\beta^2 k} \frac{d}{dy} \phi(y) \quad \text{IV-9}$$

onde a constante  $-\frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}}$  (Apêndice D) pode ser incluída no autovalor da energia. Assim, a equação de auto valores fica na forma

$$\left\{ -\frac{1}{\beta^2 k} \frac{d^2}{dy^2} + ay^2 - \frac{2}{k\beta^2} \phi'(y) \right\} \tilde{\psi}_i(y) = \left\{ \epsilon_i + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{2\pi}{\beta k} + \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}} \right\} \tilde{\psi}_i(y) \quad \text{IV-10}$$

Os autovalores e autofunções da equação acima estão relacionados com a solução do problema com o potencial original (IV-2). Em particular, o estado fundamental é dado pela equação:

$$A \tilde{\psi}_0 = 0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k} \beta} \left\{ \frac{d}{dy} + \sqrt{ka} \beta y + \phi(y) \right\} \tilde{\psi}_0 = 0 \quad \text{IV-11}$$

ou seja

$$\tilde{\psi}_0 = N e^{-\frac{1}{2} \sqrt{ka} \beta y^2 - \int_0^y \phi(\bar{y}) d\bar{y}} = \left( \frac{\sqrt{ka} \beta}{\pi} \right)^{1/4} \frac{e^{-\frac{1}{2} \sqrt{ka} \beta y^2}}{\sqrt{\Gamma^2 - \frac{\pi}{4\sqrt{ka} \beta}}} \frac{1}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\sqrt{ka} \beta}} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\sqrt{ka} \beta} y \right)} \quad \text{IV-12}$$

onde  $N$  é a constante de normalização e é determinada no apêndice E.

Dado as características do potencial IV-9, observamos que a constante  $\Gamma$  deve ser escolhida com cuidado se

quisermos evitar singularidades no potencial. Estas singularidades não existem se

$$\Gamma < - \int_0^{\infty} e^{-\sqrt{ak} \beta z^2} dz = \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \sqrt{\frac{1}{ak}} \quad \text{ou } \Gamma > 0 \quad \text{IV-13}$$

pois neste caso  $\left( \Gamma + \int_0^y e^{-\sqrt{ak} \beta z^2} dz \right)$  jamais se anula.

### iii) RESULTADOS

Os resultados apresentados são obtidos com o novo potencial (eq. IV-9), usado para simular as pontes de Hidrogênio, e o tratamento teórico desenvolvido no capítulo II.

O novo potencial possui três parâmetros ( $k$ ,  $a$  e  $\Gamma$ ) que precisam ser ajustados. Para este ajuste primeiro notamos que a função de onda IV-12, essencial para determinar a distância média entre os pares de base, depende exclusivamente do produto  $(a.k)$  e de  $\Gamma$  separadamente.

Para fixar estes parâmetros vamos usar dois critérios. Em primeiro lugar, escolhemos  $\Gamma$  de tal forma que o potencial não tenha singularidade na região de interesse para a desnaturação, qual seja no intervalo  $300 \text{ K} \leq T \leq 400 \text{ K}$ . Além disso, como a parte não harmônica do potencial é importante no estudo da desnaturação e o fator  $\Gamma$  é uma componente importante na determinação da região não harmônica, escolhemos  $\Gamma$  de forma que a

singularidade ocorra à temperatura de 400 K. Devemos destacar que esse critério também está presente no trabalho de Peyrard e Bishop<sup>(5)</sup>, pois as expressões ali encontradas são válidas somente na região  $T \leq 400$  K. Essa escolha faz com que o problema se resume a determinação do produto  $a.k$ , uma vez que  $\Gamma$  será dado por

$$\Gamma = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta} \sqrt{\frac{1}{ka}}}$$

com  $T = 400$  K.

Para determinar o produto  $(a.k)$  vamos usar o tamanho médio das pontes de Hidrogênio no DNA, dado pela distância média entre Nitrogênio-Oxigênio e Oxigênio-Oxigênio das bases nitrogenadas envolvidas na ponte, à temperatura ambiente (300 K). Este valor é  $2,88 \text{ \AA}^{(16)}$  e é obtido fazendo a média aritmética da distância de cada ponte individualmente. Para obter este valor com o novo potencial devemos ter  $a.k = 3,807 \cdot 10^{-5} (\text{eV/\AA}^2)^2$ .

Finalmente para determinar quanto valem  $a$  e  $k$  separadamente, usamos o modelo quase-contínuo e determinamos qual o melhor valor para estes parâmetros. Observando o novo potencial  $V(y)$  (eq. IV-0) percebemos que se o multiplicarmos por  $k$  o produto  $k.V(y)$  possui uma dependência apenas no produto  $(a.k)$  e em  $\Gamma$ . Como estes valores já foram determinados a segunda derivada do potencial possui, fundamentalmente, uma dependência apenas em  $k$ . Podemos, assim, ajustar este parâmetro de forma a obter o melhor resultado possível para os modos de baixa frequência calculados. Notemos que, em princípio, apenas um modo seria suficiente para fixar o valor de  $k$ .

Seguindo este critério determinamos  $a = 4,94 \cdot 10^{-2} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$  e  $k = 7,70 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$  que juntamente com  $\Gamma = -2,095$  fornece

todos os parâmetros que precisamos.

Com os valores dos parâmetros propostos acima obtemos numericamente a curva de desnaturação indicada na figura IV-1. Lembramos que através do uso do operador integral de transferência o valor médio entre as pontes de Hidrogênio vale  $\sqrt{2} \langle y \rangle$  e  $\langle y \rangle = \langle \psi_0(y) | y | \psi_0(y) \rangle$  (apêndice B, eq. B-9), neste caso  $\psi_0(y)$  é dado pela eq. (IV-2).

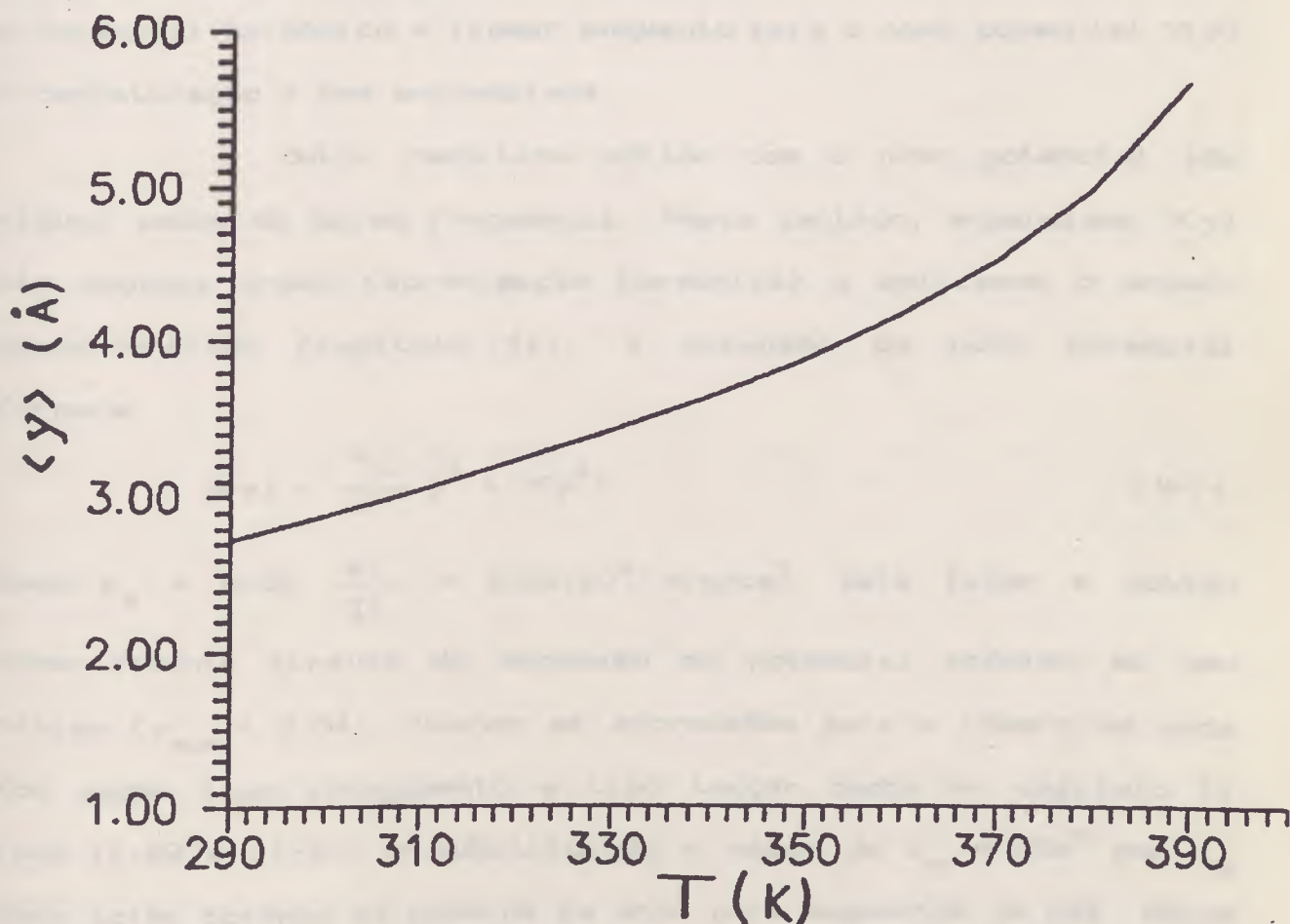


Fig. IV-1. Gráfico do valor médio da distância entre pares de base  $\langle y \rangle$  em função da temperatura  $T$ , para o novo potencial puramente harmônico.

Pelo gráfico da fig. IV-1 podemos perceber que o processo de desnaturação começa a ocorrer por volta de 360 K (onde

a curva fica mais pronunciada) o que corresponde ao observado do experimentalmente para o poly(Mix)-DNA.

No apêndice F fazemos um gráfico similar para um potencial puramente harmônico com constante de mola igual  $c = 2.029 \text{ eV}/\text{Å}^2$  (valor dado na ref. [6], e que reproduzem bem alguns modos de baixa frequência). Observamos que a curva resultante com o potencial harmônico é linear enquanto para o novo potencial  $V(y)$  a desnaturação é bem evidenciada.

Outro resultado obtido com o novo potencial são alguns modos de baixa frequência. Neste sentido, expandimos  $V(y)$  até segunda ordem (aproximação harmônica) e aplicamos o modelo quase-contínuo (capítulo II). A expansão do novo potencial fornece:

$$V(y) = \frac{k_N}{2} y^2 + O(y^4) \quad \text{IV-14}$$

onde  $k_N = 2,02 \frac{\text{eV}}{\text{Å}^2} = 3,24 \cdot 10^4 \text{ erg/cm}^2$ . Este fator é obtido numericamente através da expansão do potencial próximo ao seu mínimo ( $y_{\min} = 3.0\text{Å}$ ). Usando as expressões para o número de onda dos modos tipo alongamento e tipo torção dados no capítulo II (eqs. II-29 e II-40) e substituindo o valor de  $k_M = 2D\alpha^2$  por  $k_N$  dado acima obtemos os números de onda para segmentos de DNA. Estes resultados são mostrados na tabela IV-1.

n	A-DNA		B-DNA		Z-DNA	
	$\nu_T$	$\nu_a$	$\nu_T$	$\nu_a$	$\nu_T$	$\nu_a$
6	43,6	25,5	39,2	32,2	42,3	39,8
8	37,1	20,8	31,9	23,2	35,4	32,6
10	31,8	17,0	27,2	19,1	30,6	27,9
12	27,7	14,3	23,5	16,2	26,8	24,2
15	23,0	11,6	19,4	13,2	22,4	20,1
18	19,6	9,7	16,5	11,1	19,2	17,1
24	15,0	7,3	12,6	8,4	14,8	13,1
38	9,7	4,6	8,1	5,3	9,5	8,4
50	7,4	3,5	6,2	4,1	7,3	6,4

Tabela IV-1: Número de onda de movimento tipo torção e tipo alongamento para A-DNA, B-DNA e Z-DNA usando o novo potencial expandido até 2<sup>a</sup> ordem. ( $\tilde{\nu}$  em unidade de  $\text{cm}^{-1}$ ).

Os valores apresentados na tabela IV-1 estão próximos aos valores teóricos obtidos para o potencial puramente harmônico<sup>(6)</sup> e para o potencial de Morse expandido até 2<sup>a</sup> ordem (tabela II-1 do capítulo II). Os resultados da tabela IV-1 também são compatíveis com os dados experimentais, temos um pico característico de baixa frequência<sup>(17)</sup> em  $22 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$  para A-DNA poly(d(C-G)) e  $18 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$  para o B-DNA poly(d(MIX)<sub>12</sub>), enquanto teoricamente (tabela IV-1) obtemos  $\tilde{\nu}_{\text{along}} = 20,2 \text{ cm}^{-1}$  para o A-DNA com 8 pares de base e  $\tilde{\nu}_{\text{along}} = 16,2 \text{ cm}^{-1}$  para o B-DNA com 12 pares de base.

Outro dado experimental<sup>(10)</sup> indica uma banda em 15  $\text{cm}^{-1}$  para o A-DNA e 12  $\text{cm}^{-1}$  para o B-DNA enquanto teoricamente obtemos, com  $n = 24$  pares de base,  $\tilde{\nu}_{\text{torção}} = 14,6 \text{ cm}^{-1}$  e  $\tilde{\nu}_{\text{torção}} = 12,6 \text{ cm}^{-1}$  para o A-DNA e B-DNA, respectivamente. É importante lembrar que  $n = 24$  é o número médio de pares de base intactos<sup>(10)</sup> e portanto corresponde a frequência observada em cadeias longas do DNA segundo o modelo quase contínuo. A comparação entre teoria e os dados experimentais expostos acima mostra uma boa concordância entre ambos. Com respeito ao Z-DNA experimentalmente tem-se um pico em 30  $\text{cm}^{-1}$  para o poly(G-C)<sub>6</sub> enquanto nosso melhor resultado com  $n = 6$  é  $\nu_{\text{along}} = 38,6$ . Esta diferença, similar ao que foi discutido no capítulo II para o potencial de Morse, pode ser atribuída a dificuldade em se determinar os parâmetros para o Z-DNA ou como uma limitação do modelo quanto a tratar segmentos muito pequenos do Z-DNA.

Os resultados com os modos de baixa frequência foram usados para determinar o valor do parâmetro  $k$ , desta forma eles devem ser considerados como valores ajustados pelo parâmetro  $k$  e não como resultados advindos do uso do novo potencial.

#### iv) COMENTÁRIOS

No capítulo II comentamos sobre a existência de vários potenciais usados para descrever as pontes de Hidrogênio no DNA. Neste capítulo propomos um novo potencial para este fim. Entretanto, vale a pena salientar a origem deste novo potencial, extraído do uso conveniente da superálgebra numa teoria de campos em (1+0) dimensões.

Os resultados para a curva de valores da distância média entre pares de base,  $\langle y \rangle$ , em função da temperatura permitem caracterizar a desnaturação como sendo iniciada em cerca de 360k, um valor confirmado experimentalmente<sup>(16)</sup>.

Devemos observar, no entanto, que a curva de desnaturação para o novo potencial é menos evidenciada que a obtida quando usamos o potencial de Morse (capítulo II). Por outro lado, a curva similar obtida para o potencial puramente harmônico no Apêndice F, que é praticamente linear com a temperatura na região de interesse, não permite caracterizar a desnaturação da maneira direta como estamos fazendo. Comparando a fig. IV-1 com a fig. F-1 percebemos uma clara diferença entre elas, uma diferença deste tipo é importante pois permite distinguir o potencial original (puramente harmônico neste caso) do potencial generalizado com o auxílio da super-álgebra. No estudo da desnaturação térmica do DNA podemos concluir que o potencial generalizado é propício para descrever a desnaturação térmica, enquanto o potencial puramente harmônico não é apropriado.

Os valores para os modos de baixa frequência obtidos através do uso do novo potencial estão bem próximos aos valores obtidos para outros potenciais através do modelo quase contínuo (potencial puramente harmônico<sup>(6)</sup> e potencial de Morse, cujos resultados são apresentados na tabela II-1 do capítulo II).

## CAPITULO V

## CONCLUSAO

Através do estudo teórico que desenvolvemos nesta tese percebemos que, apesar da complexidade da molécula de DNA, conseguimos desenvolver modelos em que obtemos resultados compatíveis com os dados experimentais. No capítulo II, o operador integral de transferência<sup>(5)</sup> e o modelo quase contínuo<sup>(6)</sup> foram introduzidos como ferramentas teóricas bastante úteis para estudar o comportamento do DNA, tanto na desnaturação térmica como para os modos de baixa frequência. É importante observar que o modelo quase-contínuo, da maneira como foi introduzido, serve também como um teste para avaliar se os parâmetros do potencial usado para simular as pontes de hidrogênio estão bem ajustados. Este modelo pode ser aplicado em qualquer tipo de potencial<sup>(24)</sup>, basta expandir o potencial em torno de um mínimo estável e considerar apenas a aproximação harmônica.

No capítulo III fazemos um estudo fundamentalmente de Teoria de Campos, considerando a mecânica quântica ordinária como uma Teoria de Campos em  $(1+0)$  dimensões. Com a introdução da supersimetria na mecânica quântica exploramos algumas consequências deste formalismo. Primeiro na resolução da equação de Schrödinger para potenciais exatamente e parcialmente solúveis (usamos esta abordagem no Apêndice F). Com respeito a potenciais parcialmente solúveis é interessante notar a conexão entre o método de algebrização parcial e a mecânica quântica supersimétrica que tem permitido resolver de maneira elegante alguns sistemas quânticos<sup>(29,35)</sup>. Outra consequência do uso da super-álgebra em mecânica quântica é a possibilidade de gerar novos potenciais exatamente solúveis partindo da supersimetrização de hamiltonianos cujas soluções são conhecidas. Este procedimento tem gerado vários novos potenciais<sup>(40-42)</sup> que podem ser

distinguidos dos potenciais de partida através da forma da função de onda, uma vez que os espectros são idênticos.

Com o uso da super-álgebra na equação tipo Schrödinger (eq. II-6) que surge quando usamos o operador integral de transferência para estudar a desnaturação térmica do DNA, propomos um novo potencial (eq. IV-9) para simular as pontes de hidrogênio no DNA. Este potencial surge da generalização do potencial harmônico através da supersimetria. A escolha do novo potencial foi feita visando introduzir o menor número possível de parâmetros e descrever os efeitos estudados, desnaturação térmica e alguns modos de baixa frequência. Comparando com outros potenciais usados para simular as pontes de hidrogênio no DNA notamos que sobre os potenciais tipo Leonard-Jones e de van Zandt temos a vantagem de obter a solução exata da equação tipo Schrödinger. O potencial harmônico, embora seja exatamente solúvel, não fornece uma curva satisfatória para caracterizar a desnaturação. Com respeito ao potencial de Morse uma análise mais detalhada se faz necessária. Este potencial, largamente empregado para estudar muitos efeitos observados no DNA, possui dois parâmetros ( $D$  e  $\alpha$ ) e mais um quando introduzimos a interação de empilhamento ( $k$ ). Tanto a desnaturação quando os modos de baixa frequência obtidos estão em bom acordo com a experiência (capítulo II). O novo potencial, por outro lado, possui três parâmetros ( $\alpha$ ,  $\Gamma$  e  $k$ ) e pode ser usado para descrever a desnaturação e os modos de baixa frequência (capítulo IV).

As desvantagens do novo potencial em relação ao de Morse são basicamente duas. Primeiro o pouco uso do potencial o que deixa dúvidas sobre a quantidade de efeitos que podem ser estudados de maneira satisfatória com ele. Outra desvantagem é que

para o potencial de Morse a curva de desnaturação é mais pronunciada, a distância entre pares de base sofre um aumento bem pronunciado a partir de cerca de 360k, enquanto para o novo potencial este aumento é menos abrupto. Este fato, entretanto, não atrapalha a interpretação dada anteriormente, pois embora a curva seja menos pronunciada para o novo potencial ela possui uma clara mudança de comportamento (cresce praticamente de forma linear até cerca de 360k e depois aumenta rapidamente) o que permite caracterizar a desnaturação.

Podemos pensar como vantagem o fato do novo potencial ter uma dependência explícita da temperatura. Esta é uma vantagem no sentido que podemos tirar informações sobre o comportamento do sistema em função da temperatura direto do potencial. Outra vantagem é também haver no potencial uma dependência explícita da constante  $k$ , que caracteriza a interação de empilhamento. Isto deixa claro que a interação de ponte de Hidrogênio depende do empilhamento, assim algum processo que afeta a interação de empilhamento tem consequências diretas nas pontes de hidrogênio. Por exemplo, alterando a densidade de carga do DNA devemos afetar a rigidez da macromolécula conseqüentemente as pontes de hidrogênio sofrem alteração.

Estas duas dependências explícitas, da temperatura e da interação de empilhamento, não são encontradas em nenhum outro potencial usado até agora. Por enquanto, estas vantagens são apenas conceituais, necessitando serem exploradas quantitativamente.

Olhando pelo lado de Teoria de Campos, determinamos um tipo de problema (estatístico) onde os potenciais gerados através da super-álgebra podem ser aplicados e diferenciados, via

função de onda. Em outras palavras, determinamos um parâmetro (distância média entre pares de base) que permite diferenciar o potencial de origem (oscilador harmônico, no nosso caso) do potencial generalizado através da supersimetria (nosso novo potencial).

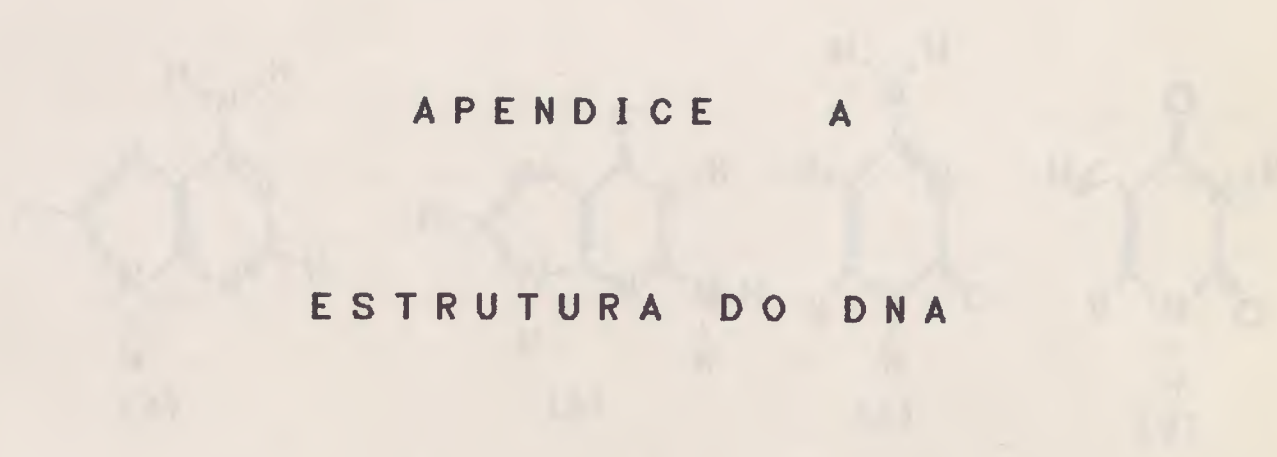
Así como se ha visto en el capítulo anterior, el ADN es un ácido nucleico que se encuentra en el núcleo de las células eucariotas y en el citoplasma de las células procariotas. Su función principal es almacenar y transmitir la información genética.

El ADN está formado por una molécula de azúcar de carbono, un grupo fosfato y una base nitrogenada. Estas tres partes forman una estructura que se repite a lo largo de la molécula, formando una cadena de nucleótidos.

La parte más importante de la estructura es la cadena de azúcar-fosfato, que forma el esqueleto de la molécula. Las bases nitrogenadas se unen a esta cadena y se emparejan entre sí, formando la estructura de doble hélice.

## APENDICE A

### ESTRUTURA DO DNA



Neste apêndice pretendemos dar uma noção geral sobre a estrutura do DNA, maiores detalhes podem ser obtidos através das referências [16] e [44].

O DNA é uma macromolécula constituída de átomos de Carbono, Nitrogênio, Oxigênio, Fosfato e Hidrogênio. Estes átomos formam três tipos básicos de moléculas: as bases nitrogenadas, o açúcar e o ácido fosfórico.

As bases nitrogenadas, ou melhor, a sequência de bases formam o código genético. No DNA as bases são Adenina, Guanina, Cytosina e Thymina, indicada na figura A-1.

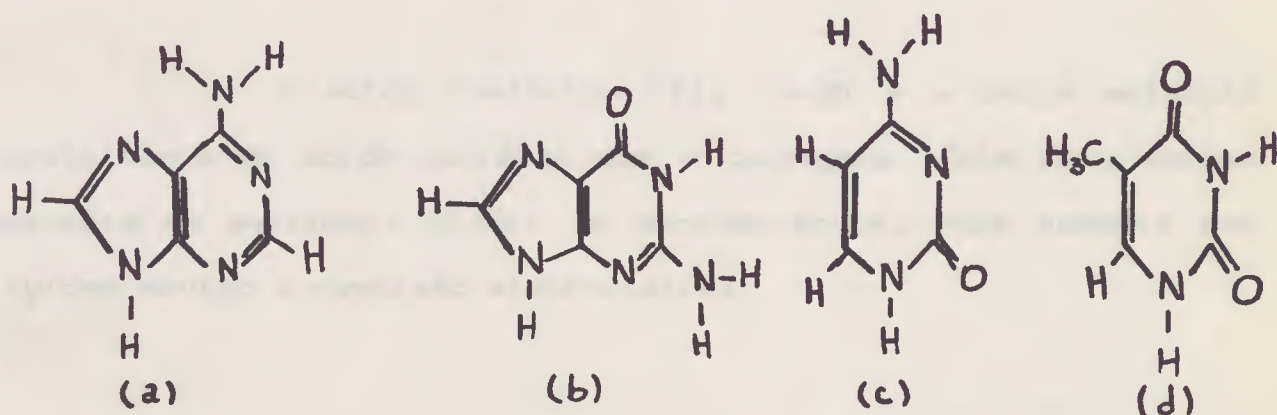


Fig. A-1: Esquema das bases: (a) Adenina, (b) Guanina, (c) Cytosina e (d) thymina.

O açúcar que compõe o DNA é um 2-desoxirribose que forma uma pentose com quatro átomos de carbono e um oxigênio formando o anel (fig. A-2).

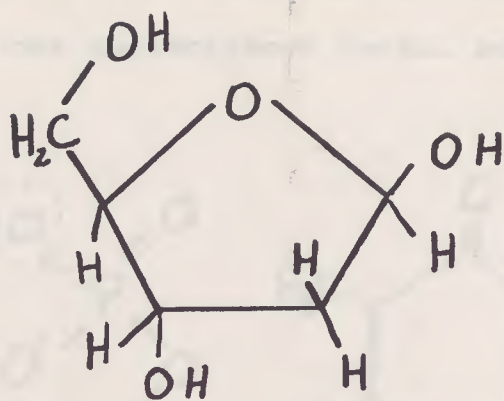


Fig. A-2: Esquema do açúcar

O ácido fosfórico (fig. A-3) é a única molécula constituinte do ácido nucléico que é carregada. Este fato influe bastante na estrutura global da macromolécula, pois aumenta sua rigidez devido a repulsão eletrostática.

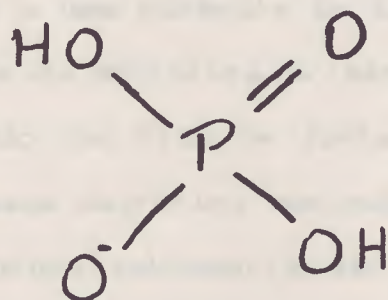


Fig. A-3: Esquema do ácido fosfórico

A unidade monomérica do DNA é composta por estas três moléculas (fig. A-4) e é chamada de nucleotídeo. A polimerização dos nucleotídeos forma, portanto, uma cadeia ou fita do DNA.

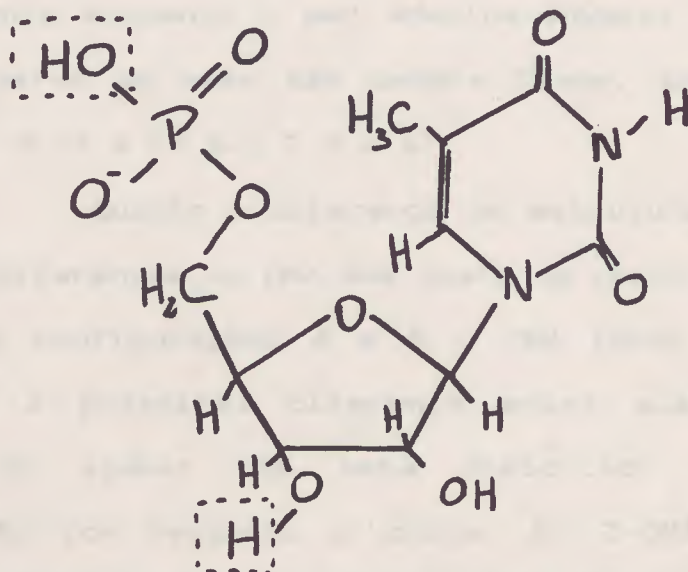


Fig. A-4: Esquema do nucleotídeo formado com a base timina, os átomos destacados são aqueles envolvidos na polimerização.

Na formação da fita do DNA o grupo OH do ácido fosfórico de um nucleotídeo se junta a um hidrogénio do açúcar de outro (fig. A-4). Como resultado desta reação química temos os nucleotídeos unidos e uma molécula de água. A estrutura da fita individual é chamada de estrutura primária.

Quando uma fita se junta a outra formando a dupla hélice temos a chamada estrutura secundária do DNA. As forças que estabilizam a estrutura secundária são basicamente as pontes de Hidrogénio entre as bases nitrogenadas e a chamada interação de empilhamento. O empilhamento atua na direção do eixo da hélice e envolve efeitos como a dispersão de London e efeitos hidrofóbicos.

Outra interação importante é a repulsão eletrostática provocada pelos grupos fosfatos carregados negativamente.

A quantidade de pontes de Hidrogênio entre as bases é diferente, pois o par Guanina-Cytosina (G-C) possui três pontes de Hidrogênio enquanto o par Adenina-Thymina (A-T) possui apenas duas. Os pares de base são sempre fixos, assim a fita unida a (A T G A C G T) é (T A C T G C A).

Quanto a diferença na estrutura secundária, podemos ter tipos diferentes de DNA dos quais os principais são o A-, B- e Z-DNA. Nas configurações A e B o DNA forma uma hélice de mão direita e a principal diferença entre elas está no arranjo espacial do açúcar que está distorcido se comparamos uma configuração com respeito a outra. No Z-DNA a mudança é mais radial, pois este possui configuração de mão esquerda. No apêndice C apresentamos alguns parâmetros estruturais que diferenciam uma configuração da outra.

APENDICE B

OPERADOR INTEGRAL DE TRANSFERENCIA

A técnica de Matriz de Transferência<sup>(45)</sup> permite relacionar um problema de mecânica estatística com um problema "quântico", através de uma equação tipo Schrödinger.

Vamos partir de um funcional da energia

$$F[y] = \frac{1}{2} k (y_n - y_{n-1})^2 + V(y_n) \quad \text{B-1}$$

e determinar qual seria a equação tipo Schrödinger associada a ele. A função partição, neste caso, é escrita

$$Z = \int \delta y e^{-\beta F[y]} = \int \prod_{n=1}^N dy_n e^{-\beta f(y_n, y_{n-1})} \quad \text{B-2}$$

onde podemos impor condições periódicas de contorno ( $y_{N+1} = y_N$ ).

Vamos introduzir na expressão acima uma variável adicional  $\tilde{y}_1$ ,

assim

$$Z = \int d\tilde{y}_1 dy_1 dy_2 \dots dy_N \delta(y_1 - \tilde{y}_1) e^{-\beta f(\tilde{y}_1, y_N)} e^{-\beta f(y_N, y_{N-1})} \dots e^{-\beta f(y_2, y_1)} \quad \text{B-3}$$

A função delta pode ser escrita em termos de funções  $\Psi_n$ , que podem ser tomados como um conjunto de auto-estados normalizados:

$$\delta(y_1 - \tilde{y}_1) = \sum_n \Psi_n^*(\tilde{y}_1) \Psi_n(y_1). \quad \text{Com esta substituição a função}$$

partição é escrita

$$Z = \sum_n \int d\tilde{y}_1 dy_1 \dots dy_N \Psi_n^*(\tilde{y}_1) e^{-\beta f(\tilde{y}_1, y_N)} \dots e^{-\beta f(y_2, y_1)} \Psi_n(y_1) \quad \text{B-4}$$

Escolhendo  $\Psi_n$  como auto-estados do operador transferência, ou seja

$$\int dy_{i-1} e^{-\beta f(y_i, y_{i-1})} \Psi_n(y_{i-1}) = e^{-\beta \epsilon_n} \Psi_n(y_i) \quad \text{B-5}$$

podemos escrever a função partição B-2 como sendo

$$Z = \sum_n e^{-N\beta \epsilon_n} \quad \text{B-6}$$

No limite para um sistema grande ( $N \rightarrow \infty$ ) o resultado é dominado pelo estado fundamental e a energia livre por par de base é dada por

$$f = -kT \ln Z = -kT \ln e^{-\beta \epsilon_0} = \epsilon_0 \quad \text{B-7}$$

O valor médio de  $y$ , que no nosso caso (capítulo II e IV) representa a distância média entre os pares de base do DNA, vale

$$\langle y \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N \langle \Psi_i(y) | y | \Psi_i(y) \rangle e^{-N\beta \epsilon_i}}{\sum_{i=1}^N \langle \Psi_i(y) | \Psi_i(y) \rangle e^{-N\beta \epsilon_i}} \quad \text{B-8}$$

e quando o estado fundamental domina obtemos

$$\langle y \rangle = \langle \Psi_0(y) | y | \Psi_0(y) \rangle \quad \text{B-9}$$

onde o auto-estado  $\Psi_0(y)$  já está normalizado.

Precisamos agora encontrar um meio de determinar  $\epsilon_n$  e  $\Psi_n(y)$ . Com este fim vamos expandir as funções  $\Psi_n(y_{i-1})$  em torno de  $\Psi_n(y_i)$  dentro do operador transferência (B-5):

$$\begin{aligned}
 & \int dy_{i-1} e^{-\beta f(y_i, y_{i-1})} \Psi_n(y_{i-1}) = \\
 & = e^{-\beta V(y_i)} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_{i-1} e^{-\frac{\beta k}{2} (y_i - y_{i-1})^2} \left\{ \Psi_n(y_i) + (y_{i-1} - y_i) \Psi'_n(y_i) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} (y_{i-1} - y_i)^2 \Psi''_n(y_i) + \dots \right\}
 \end{aligned}
 \tag{B-10}$$

onde os termos que dependem apenas de  $y_i$  podem ser fatorados na integral, pois o primeiro termo de expansão fornece uma integral gaussiana em  $y_{i-1}$ , o segundo termo possui resultado nulo após integrado (integral de uma função ímpar) e o terceiro termo resulta em algo do tipo  $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx$ .

Assim obtemos

$$\int dy_{i-1} e^{-\beta f(y_i, y_{i-1})} \Psi_n(y_{i-1}) = e^{-\beta V(y_i)} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta k}} \left[ 1 + \frac{1}{2\beta k} \frac{d^2}{dy_i^2} + \dots \right] \Psi_n(y_i)$$

B-11

Formalmente entendemos a expressão entre colchetes como a expansão de uma exponencial:

$$\exp \left\{ \frac{1}{2\beta k} \frac{d^2}{dy_i^2} \right\} = 1 + \frac{1}{2\beta k} \frac{d^2}{dy_i^2} + \dots$$

B-12

Portanto, o operador integral de transferência pode ser reescrito na forma

$$\begin{aligned}
 & \int dy_{i-1} e^{-\beta f(y_i, y_{i-1})} \Psi_n(y_{i-1}) = \exp \left\{ \frac{1}{2\beta k} \frac{d^2}{dy_i^2} - \beta V(y_i) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} \ln \frac{2\pi}{\beta k} \right\} \Psi_n(y_i)
 \end{aligned}$$

B-13

Juntando esta nova forma com a relação B-5 obtemos que

$$\exp \left\{ \frac{1}{2\beta k} \frac{d^2}{dy_i^2} - \beta V(y_i) + \frac{1}{2} \ln \frac{2\pi}{\beta k} \right\} \Psi_n(y_i) = e^{-\beta \epsilon_n} \Psi_n(y_i) \quad \text{B-14}$$

ou seja

$$\left\{ -\frac{1}{2\beta^2 k} \frac{d^2}{dy_i^2} + V(y_i) \right\} \Psi_n(y_i) = \left\{ \epsilon_n + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{2\pi}{\beta k} \right\} \Psi_n(y_i) \quad \text{B-15}$$

Esta equação é formalmente idêntica a equação de Schrödinger para uma partícula em um potencial  $V(y)$ , cujos valores de  $\Psi_n$  e  $\epsilon_n$  solucionam o problema estatístico contido na função partição inicial (B-2).

A equação tipo Schrödinger usada no capítulo II (eq. II-6) difere de B-15, pois fazemos uma substituição de variáveis:  $\sqrt{2} y_i \rightarrow y_i$ , o que introduz um fator 2 multiplicando a derivada segunda. Esta substituição é feita para retirar o fator  $\sqrt{2}$  que aparece como consequência da introdução das coordenadas normais.

Os parâmetros de estrutura do DNA são determinados a partir de dados de difração de raios X e de medidas de viscosidade intrínseca em solução aquosa de cloreto de sódio. Os dados de difração de raios X são analisados por meio de métodos de refinamento de estrutura cristalina, enquanto os dados de viscosidade são analisados por meio de métodos de análise de dados de viscosidade.

$$[\eta] = 0,45 \times 10^{-4} \times M^{0,75}$$

Os dados de difração de raios X são analisados por meio de métodos de refinamento de estrutura cristalina, enquanto os dados de viscosidade são analisados por meio de métodos de análise de dados de viscosidade.

	$r$	$\rho_{DNA}$	$M_w$
1-DNA	0,375	1,00	1,20
2-DNA	0,375	1,00	1,00
3-DNA	0,375	1,00	0,75

**APENDICE C**

**PARAMETROS ESTRUTURAIS DO DNA**

Os parâmetros que apresentamos aqui são os mesmos usado por Chou et al<sup>(6)</sup>.

A massa total da molécula de DNA dividido pelo número total de pares de base é

$$\langle m \rangle = 1,0224 \times 10^{-21} \text{ g}$$

Os outros parâmetros usados para calcular os modos de baixa frequência com o modelo quase-contínuo estão dados na tabela C-1.

	$\xi$	$g(n)$	$H/2r$
A-DNA	$0,972\pi$	$11/n$	1,49
B-DNA	$0,783\pi$	$10/n$	2,06
Z-DNA	0,761	$12/n$	2,76

Tabela C-1: Parâmetros estruturais para o A-, B- e Z-DNA.

... (faded text) ...

... (faded text) ...

### APENDICE D

## CALCULO DO NOVO POTENCIAL PARA AS PONTES DE HIDROGENIO

... (faded text) ...

O cálculo que apresentamos neste apêndice é formalmente idêntico ao desenvolvido no capítulo II, quando generalizamos o potencial harmônico. Entretanto, os parâmetros são diferentes, pois a equação de partida não é uma equação de Schrödinger como na teoria quântica, mas sim uma equação analoga. É importante acompanhar o papel dos novos parâmetros dentro do nosso cálculo, pois eles envolvem grandezas físicas importantes tais como a temperatura e a constante de mola que simula a interação de empilhamento.

Da (eq. IV-6) do texto juntamente com a definição dos operadores  $A^{\pm}$  (eq. IV-5) e a forma do hamiltoniano  $H_{-}$  (eq. IV-4) obtemos a equação de Ricatti:

$$ay^2 + \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}} = \frac{1}{k \beta^2} \left\{ f^2(y) + f'(y) \right\} \quad D-1$$

cuja solução particular é encontrada através dos operadores  $a^{\pm}$  (eq. IV-3):

$$f_p(y) = \sqrt{ak} \beta y \quad D-2$$

A solução geral é determinada fazendo:

$$f(y) = \sqrt{ak} \beta y + \phi(y) \quad D-3$$

onde  $\phi(y)$  é obtida substituindo D-3 na equação de Ricatti D-1. Com este procedimento chegamos a seguinte equação

$$\phi^2(y) + \phi'(y) + 2 \sqrt{ak} \beta y \phi(y) = 0 \quad D-4$$

Dividindo D-4 por  $\phi^2(y)$  chegamos a

$$1 + \frac{\phi'(y)}{\phi^2(y)} + 2\sqrt{ak} \beta y \frac{1}{\phi(y)} = 0 \quad \text{D-5}$$

onde podemos introduzir a função  $Y(y) = \frac{1}{\phi(y)}$  :

$$-Y'(y) + 2\sqrt{ak} \beta y Y(y) + 1 = 0 \quad \text{D-6}$$

O caminho para calcular  $Y(y)$  na eq. D-6 é primeiro resolver a equação homogênea:

$$-Y'_H(y) + 2\sqrt{ak} \beta y Y_H(y) = 0 \quad \text{D-7}$$

ou seja:

$$Y'_H(y) = N e^{\sqrt{ak} \beta y^2} \quad \text{D-8}$$

Fazendo  $N$  dependente da variável  $y$ ; a solução da equação não homogênea é:

$$Y(y) = N(y) e^{\sqrt{ak} \beta y^2} \quad \text{D-9}$$

onde  $N(y)$  é determinado substituindo D-9 em D-6; ou seja

$$-N'(y) e^{\sqrt{ak} \beta y^2} + 1 = 0 \quad \text{D-10}$$

o que implica em

$$N(y) = \int_0^y e^{-\sqrt{ak} \beta z^2} dz + \Gamma \quad \text{D-11}$$

$\Gamma$  é a constante de integração.

Finalmente, lembrando que  $\phi(y) = \frac{1}{Y(y)}$  e usando (D-9) e (D-11) obtemos

$$\phi(y) = \frac{e^{-\sqrt{ak} \beta y^2}}{\Gamma + \int_0^y e^{-\sqrt{ak} \beta z^2} dz} \quad \text{D-12}$$

que é a função indicada no texto (eq. IV-8).

Por outro lado, os novos operadores (eq. IV-5) satisfazem a relação de comutação:

$$[A^+, A^-] = -\frac{2}{k\beta^2} \frac{d}{dy} f(y) = -\frac{2}{k\beta^2} \left\{ \sqrt{ak} \beta + \phi'(y) \right\} \quad \text{D-13}$$

Esta relação permite definir o novo Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_+ &= A^+ A^- = A^- A^+ + [A^+, A^-] = H_- + [A^+, A^-] = \\ &= -\frac{1}{k\beta^2} \frac{d^2}{dy^2} + ay^2 - \frac{2}{k\beta^2} \frac{d}{dy} \phi(y) - \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}} \end{aligned} \quad \text{D-14}$$

O novo potencial extraído de  $\mathcal{H}_+$  vale

$$\mathcal{V}(y) = ay^2 - \frac{2}{k\beta^2} \frac{d}{dy} \phi(y) - \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{k}} \quad \text{D-15}$$

Esta é a forma do potencial indicada no capítulo IV (eq. IV-9). O termo constante pode ser incluído no autovalor da energia, deslocando assim o espectro.

APENDICE E

CALCULO DA FUNCAO DE ONDA DO  
ESTADO FUNDAMENTAL PARA O  
NOVO POTENCIAL

No capítulo IV determinamos a função de onda do estado fundamental para o novo potencial como sendo (eq. IV.12):

$$\tilde{\psi}_0(y) = N e^{-\frac{1}{2} \alpha y^2 - \int_0^y \phi(z) dz} \quad \text{E-1}$$

onde  $\alpha = \sqrt{ak} \beta$

$$\phi(y) = \frac{e^{-\alpha y^2}}{\Gamma + \int_0^y e^{-\alpha z^2} dz} \quad \text{E-2}$$

Entretanto temos<sup>(46)</sup>:

$$\int_0^y e^{-\alpha z^2} dz = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} y) \quad \text{E-3}$$

onde  $\operatorname{erf}(x)$  é a função erro. Assim podemos reescrever a eq. E-2:

$$\phi(y) = \frac{e^{-\alpha y^2}}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} y)} \quad \text{E-4}$$

Para calcular a função de onda  $\tilde{\psi}_0(y)$  precisamos primeiro determinar

$$\int_0^y \phi(z) dz = \int_0^y \frac{e^{-\alpha z^2}}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} z)} dz \quad \text{E-5}$$

Esta integral é resolvida usando a seguinte relação:

$$\frac{d}{dz} \ln \left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} z) \right] = \frac{e^{-\alpha z^2}}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} z)} \quad \text{E-6}$$

lembrando que  $\frac{d}{dz} \left[ \operatorname{erf} \left( \sqrt{\alpha} z \right) \right] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\alpha} e^{-\alpha z^2}$ . Com a relação

acima resolvemos a integral E-5:

$$\begin{aligned} \int_0^y \phi(z) dz &= \int_0^y \frac{d}{dz} \left\{ \ln \left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\alpha} z \right) \right] \right\} dz = \\ &= \ln \left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\alpha} y \right) \right] \end{aligned} \quad \text{E-7}$$

Portanto a função de onda E-1 assume a forma:

$$\tilde{\psi}_0(y) = N \frac{e^{-\frac{1}{2} \alpha y^2}}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} y)} \quad \text{E-8}$$

A constante de normalização N é encontrada através da relação:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0^2(y) dy = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha y^2} dy}{\left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\alpha} y \right) \right]^2} = 1 \quad \text{E-9}$$

A integral indicada acima é calculada notando que

$$\frac{d}{dy} \left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\alpha} y \right) \right]^{-1} = - \frac{e^{-\alpha y^2} dy}{\left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\alpha} y \right) \right]^2}$$

E-10

ou seja,

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} [\tilde{\psi}_0(y)]^2 dy &= -N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dy} \left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} y) \right] dy = \\
 &= -N^2 \left[ \frac{1}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} y)} \right]_{-\infty}^{+\infty} = \\
 &= N^2 \left[ \frac{1}{\Gamma - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}} - \frac{1}{\Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}} \right] = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \frac{1}{\Gamma^2 - \frac{1}{4} \frac{\pi}{\alpha}}
 \end{aligned}$$

E-11

onde usamos que a função erro é uma função ímpar [ $\operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}(z)$ ] e que  $\lim_{z \rightarrow \infty} \operatorname{erf}(z) = 1$ . Igualando a integral acima a 1 obtemos:

$$N = \left[ \frac{\alpha}{\pi} \right]^{1/4} \sqrt{\Gamma^2 - \frac{\pi}{4\alpha}}$$

E-12

Finalmente, obtemos que a forma analítica da função de onda (E-1) vale

$$\tilde{\psi}_0(y) = \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \sqrt{\Gamma^2 - \frac{\pi}{4\alpha}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\alpha y^2}}{\left[ \Gamma + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} y) \right]}$$

E-13

APENDICE F

DISTANCIA MEDIA ENTRE PARES DE  
BASE TOMANDO UM POTENCIAL  
PURAMENTE HARMONICO

Vamos partir de um potencial harmônico  $V(y) = \frac{c}{2} y^2$  para tentar simular a ligação entre as pontes de hidrogênio no DNA<sup>(6)</sup>. A desnaturação térmica, seguindo o formalismo usado no capítulo II, é estudado a partir da resolução da equação tipo Schrödinger (II-6):

$$\left\{ -\frac{1}{\beta^2 k} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{c}{2} y^2 \right\} \Psi_i = \left\{ \varepsilon_i + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{2\pi}{\beta k} \right\} \Psi_i \quad \text{F-1}$$

Através do método de resolução da equação de Schrödinger desenvolvido no capítulo III, podemos calcular a autofunção do estado fundamental. Para tanto, fatoramos o Hamiltoniano dado em F-1 pelos operadores.

$$a^\pm = \sqrt{\frac{1}{\beta^2 k}} \left\{ \mp \frac{d}{dy} + \sqrt{\frac{\beta^2 k c}{2}} y \right\} \quad \text{F-2}$$

Desta forma

$$H_+ = a^+ a^- = -\frac{1}{\beta^2 k} \frac{d}{dy} + \frac{c}{2} y^2 - \sqrt{\frac{c}{2\beta^2 k}} \quad \text{F-3}$$

Assim, pela super-algebra, sabemos que o fator  $\sqrt{\frac{c}{2\beta^2 k}}$  está associado com a energia do estado fundamental e a autofunção deste estado obedece a equação.

$$a^- \psi_0 = 0 \rightarrow \left\{ \frac{d}{dy} + \sqrt{\frac{\beta^2 k c}{2}} y \right\} \psi_0 = 0 \quad \text{F-4}$$

Esta equação diferencial de primeira ordem fornece:

$$\psi_0 = N e^{-\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{kc}{2}} y^2} \quad \text{F-5}$$

onde N é a constante de normalização e neste caso vale

$$N = \left[ \frac{\sqrt{2} \pi}{\beta \sqrt{kc}} \right]^{-1/4} \quad \text{F-6}$$

Estamos interessados em calcular a distância média entre os pares de base; que para o potencial harmônico é zero,

$$\langle y \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^2 y \, dy = 0 \quad \text{F-7}$$

pois o integrando é uma função ímpar. Para determinar um comprimento característico para as pontes de hidrogênio vamos lançar mão de um artifício comumente usado para caracterizar o tamanho de polímeros, cuja distribuição de probabilidade entre dois monômeros primeiros vizinhos é gaussiana. O artifício é calcular o raio quadrático médio,  $\langle y^2 \rangle$ , e associar sua raiz quadrada ao comprimento característico procurado<sup>(47)</sup>. Seguindo este procedimento obtemos

$$\langle y^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^2 y^2 \, dy = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{1}{2kc}} \quad \text{F-8}$$

ou seja

$$\bar{y} = \sqrt{\langle y^2 \rangle} = \left[ k_B T \sqrt{\frac{1}{2kc}} \right]^{1/2} \quad \text{F-9}$$

Usando o valor de  $c = 2.029 \text{ eV}/\text{Å}^2$  dado na ref.[6] para um segmento poly(MIX) DNA, que corresponde ao sistema que estamos analisando, podemos determinar quanto seria o valor de  $k$  impondo que em  $T = 300 \text{ K}$  obtenhamos  $\bar{y} \sim 2,88 \text{ Å}$ . A figura A-1 mostra o gráfico de  $\sqrt{2} \bar{y} \times T$  com o valor de  $k = 2.371 \cdot 10^{-4} \text{ eV}/\text{Å}^2$ , que satisfaz este argumento fenomenológico. Nesta curva é difícil caracterizar a desnaturação. Percebemos que, dentro da faixa de temperatura em que estamos interessados,  $\bar{x}$  tem uma variação aproximadamente

linear com T. Poderíamos colocar uma distância crítica entre os pares de base em que a desnaturação começa a ocorrer. Entretanto, a necessidade desta imposição artificial mostra que a teoria não está dando informação nova sobre o sistema, praticamente toda informação é colocada artificialmente.

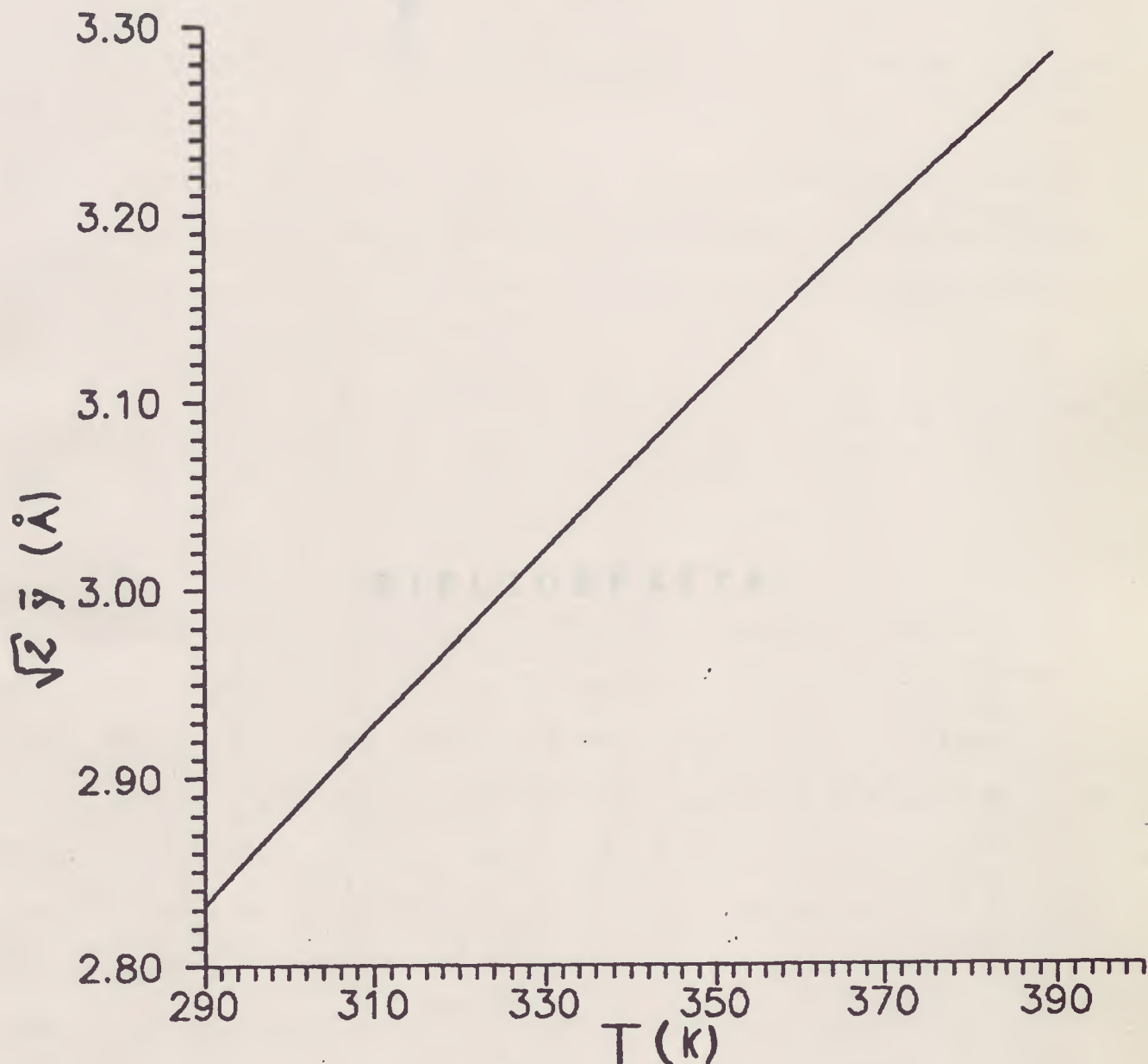


fig. 1 - Curva de  $\bar{y}$  pela temperatura para um potencial puramente harmônico.

BIBLIOGRAFIA

- [1] H.M. Sobell in Structure of Biological Macromolecules and Assemblies, Vol. II, eds. F. Jurmak and A. Mc Pherson (New York, Wiley, 1984) p. 172
- [2] E. Witten Nucl. Phys. B185 513 (1981)
- [3] L.E. Gendenshtein and I.V. Krive Sov. Phys. Usp. 28 645 (1985)
- [4] A. Lahiri, P.K. Roy and B. Bagchi Int. Mod. Phys. 5 1383 (1990)
- [5] M. Peyrard and A.R. Bishop Phys. Rev. Lett. 62 2755 (1989)
- [6] K.C. Chou, G.M. Maggiora and B. Mao Biophys. J. 56 295 (1989)
- [7] L. Young, V.V. Prabhu, E.W. Prohofsky and G.S. Edwards Phys. Rev. A41 7020 (1990)
- [8] J.W. Powell, G.S. Edwards, L. Genzel, F. Kramer, A. Wittlin, W. Kubasek and W.L. Peticolas Phys. Rev. A34 3029 (1987)
- [9] V.K. Saxena, B.H. Dorfman and L.L. van Zandt Phys. Rev. A43 4510 (1991)
- [10] Y. Gao and E.W. Prohofsky J. Chem. Phys. 80 2242 (1984)
- [11] P.M. Morse Phys. Rev. 34 57 (1929)
- [12] K.M. Awati and E.W. Prohofsky Phys. Rev. A40 6521 (1989)
- [13] N. Colin Baird Int. J. Quantum Chem: Quantum Biology Symp. 49 (1974)
- [14] M. Techera, L.L. Daemen and E.W. Prohofsky Phys. Rev. A40 6636 (1989)
- [15] E.W. Englander, N.R. Kallenbach, A.J. Krumhansul and S. Litwin Proc. Natl. Acad. Sci. USA 77 7222 (1980)
- [16] W. Saenger "Principles of Nucleic Acid Structure" (1984) Ed. Springer-Verlag (New York Inc.)

- [17] D.P. Lamba, A.H.J. Wang and G.J. Thomas Jr. *Biopolymers* 28 667 (1989)
- [18] J.M. Lindsay, J.W. Powell and A. Rupprecht *Phys. Rev. Lett.* 53 1853 (1984)
- [19] C. Mandal, N.R. Kallenbach and S.W. Englander *J. Mol. Biol.* 135 391 (1979)
- [20] T. Weidlich, S.M. Lindsay and A. Rupprecht *Phys. Rev. Lett.* 61 1674 (1988)
- [21] E. Drigo Filho and J.R. Ruggiero *Phys. Rev.* A44 8435-8436 (1991)
- [22] V.I. Poltev and N.V. Schulyupina *J. Biomolec. Struc. and Dynamics* 3 739 (1986)
- [23] L.L. van Zandt *Phys. Rev.* A40 6134 (1989)
- [24] V.A. Kostelecky and M.M. Nieto *Phys. Rev. Lett.* 53 2285 (1984)
- [25] A. Comtet, A. Bandrauk and D. Campbell *Phys. Lett.* B150 159 (1985)
- [26] A.J. Niemi and G.W. Semenoff *Phys. Rep.* 135 100 (1986)
- [27] F. Ravndal "Elementary Supersymmetry" CERN School of Physics CERN 85-11 p.300 (1984)
- [28] F. Cooper and B. Freedman *Ann. Phys. NY* 146 262 (1983)
- [29] E. Gozzi *Phys. Rev.* D33 3665 (1986)
- [30] L.E. Gendenshtein *JETP Lett.* 38 357 (1983)
- [31] C.V. Sukumar *J. Phys. A: Math. Gen.* 18 L57 (1985)
- [32] E. Drigo Filho and R.M. Ricotta *Mod. Phys. Lett.* A4 2283 (1989)
- [33] P. Roy, B. Roy and R. Roychoudhury *Phys. Lett.* A139 427 (1989)

- [34] M.A. Shifman Int. J. Mod. Phys. A4 2897 (1989)
- [35] E. Drigo Filho and R.M. Ricotta Mod. Phys. Lett. A6 2137  
(1991)
- [36] B. Mielnik J. Math. Phys. 25 3387 (1984)
- [37] D.J. Fernandes C. Lett. Math. Phys. 8 337 (1984)
- [38] C. Zhu J. Phys. A: Math. Gen. 20 4331 (1987)
- [39] M.M. Nieto Phys. Lett 145B 208 (1984)
- [40] N.A. Alves and E. Drigo Filho J. Phys. A: Math. Gen. 21 3215  
(1988)
- [41] E. Drigo Filho J. Phys. A: Math. Gen. 21 L1025 (1988)
- [42] E. Drigo Filho Rev. Bras. Fis. 20 258 (1990)
- [43] M.A. Shifman Int. J. Mod. Phys. A4 3305 (1989)
- [44] R. Cantor and P.R. Schimmel "Biophysical Chemistry" (1980)  
Ed. W. Freeman and Company (New York)
- [45] D.J. Scalapino, M. Sears and R.A. Ferrel Phys. Rev. B6 3409  
(1972)
- [46] M. Abramowitz and A. Stegun "Handbook of Mathematical  
Functions" (1972) Dover Publications (New York)
- [47] M. Doi and S.F. Edwards "The Theory Polymer Dynamics" (1986)  
Oxford University Press. (New York)

