



RODRIGO PRAZERES DE HOLANDA

**UMA PROPOSTA DE TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA DA MECÂNICA QUÂNTICA
PARA O ENSINO MÉDIO**

Caruaru, 2017

RODRIGO PRAZERES DE HOLANDA

**UMA PROPOSTA DE TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA DA MECÂNICA
QUÂNTICA PARA O ENSINO MÉDIO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Física (ProFis) do Centro Acadêmico do Agreste da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ensino de Física.

Área de concentração: Formação de Professores de Física em Nível de Mestrado

Orientador: Prof. Dr. Augusto César Lima Moreira

Caruaru, 2017

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Paula Silva CRB/4 - 1223

H722p Holanda, Rodrigo Prazeres de.
Uma proposta de transposição didática da mecânica quântica para o ensino médio. /
Rodrigo Prazeres de Holanda. – 2017.
111 f.; il.: 30 cm.

Orientador: Augusto César Lima Moreira.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, Mestrado
Nacional Profissional em Ensino de Física, 2017.
Inclui referências.

1. Teoria quântica. 2. Didática (Ensino médio). 3. Analogia. 4. Física (Ensino
médio). I. Moreira, Augusto César Lima (Orientador). II. Título.

371.12 CDD (23. ed.) UFPE (CAA 2017-489)

RODRIGO PRAZERES DE HOLANDA

**UMA PROPOSTA DE TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA DA MECÂNICA
QUÂNTICA PARA O ENSINO MÉDIO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Física (ProFis) da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Ensino de Física.

Aprovada em: 07 / 12 / 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof^o. Dr. Augusto Cesar Lima Moreira (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^o. Dr. Gustavo Camelo Neto (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^o. Dr. Michael Lee Sundheimer (Examinador Externo)
Universidade Federal Rural de Pernambuco

*Decido esta dissertação
à minha esposa Mayara, à minha mãe Tania,
ao meu pai Antonio e ao meu irmão Gustavo.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por ter me dado condições de chegar até aqui com saúde, discernimento e uma família maravilhosa.

À minha esposa Mayara, minha mãe Tania, meu pai Antonio e meu irmão Gustavo, pelo apoio e amor que me dedicaram ao longo dos anos. São a minha razão de ser.

À minha sogra Abilene e meu sogro Welington, pelo carinho que sempre me demonstraram.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Augusto César Moreira, pela paciência, confiança, ensinamentos e momentos de amizade.

Ao meu amigo Erik Cordeiro, pela relação de irmandade e confiança com a qual sempre tenho tido o privilégio de contar.

Aos professores do MNPEF que contribuíram diretamente para este salto em minha carreira: Gustavo Camelo, Paulo Peixoto, Sérgio Campello, João Freitas, Jehan Fonseca, Thatyara Freire e Luís Leão.

À CAPES pelo aporte financeiro tão essencial pra o custeio dos livros, hospedagens e longos deslocamentos.

À Sociedade Brasileira de Física (SBF) e ao Centro Acadêmico do Agreste (UFPE), pela valorosa iniciativa em promover este importante curso.

À Secretaria de Educação de Pernambuco e à direção da Escola Maria da Conceição do Rego Barros Lacerda, pela concessão da licença parcial para curso.

Aos amigos professores da Escola de Referência em Ensino Médio Conde Pereira Carneiro pelo apoio em todos os momentos de dificuldade.

Aos colegas de turma do MNPEF, pelos momentos de trabalho e de descontração.

E aos estudantes que participaram do laboratório pedagógico possibilitando a realização dos testes necessários à conclusão deste trabalho.

RESUMO

Este trabalho consiste em uma proposta de transposição didática de tópicos de mecânica quântica para estudantes do ensino médio, que foi desenvolvida através de ensino com analogia e de um *kit* de estudos probabilísticos. O manuseio do *kit* e os tópicos de mecânica quântica a serem tratados, compõem uma apostila – produto educacional – apresentada no APENDICE D, desenvolvida com o objetivo de estimular e fornecer suporte ao professor de física que pretenda abordar esse conteúdo em sala de aula. A metodologia empregada se deu em três etapas, envolvendo docentes, discentes e materiais instrucionais. Em relação aos docentes, foi realizada uma sondagem a respeito da mecânica quântica em sua formação e atuação profissional. No que concerne aos materiais, pesquisou-se a abordagem da mecânica quântica em livros didáticos e paradidáticos, o que se constatou ser insuficiente, asseverando a necessidade de desenvolver um material específico. Este, por sua vez, foi aplicado em um laboratório pedagógico junto aos estudantes, através de uma sequência didática. Os resultados foram analisados com base em três momentos: na sondagem inicial do questionário pré-teste, os estudantes demonstraram pouco conhecimento acerca dos pré-requisitos necessários para o estudo da mecânica quântica. O exercício operacional, realizado após as intervenções didáticas, possibilitou verificar consideráveis avanços no tocante aos novos conceitos assimilados e à linguagem matemática utilizada. E cerca de dois meses após o término da sequência didática, um questionário pós-teste apontou que a maioria dos estudantes ainda era capaz de discutir de forma coerente as ideias abordadas ao longo da intervenção didática. Em suma, constatou-se que o produto educacional desenvolvido, embora propenso a futuros aperfeiçoamentos, mostrou-se uma potencial ferramenta para a abordagem da mecânica em turmas do ensino médio, tendo em vista o que foi apresentado pelos estudantes ao final do processo didático.

Palavras-chave: Mecânica quântica. Transposição didática. Ensino com analogias.

ABSTRACT

This work consists of a didactic transposition of topics of quantum mechanics for high school students, which was developed through teaching with analogy and a kit of probabilistic studies. The handling of the kit and the topics of quantum mechanics to be treated, compose a workbook – educational product – presented in APPENDIX D, developed with the aim to stimulate and provide support to the physics teacher who intends to address this content in the classroom. The methodology used was in three stages, involving teachers, students and instructional materials. Concerning teachers, a survey was made on quantum mechanics in their training and professional performance. Regarding the materials, the quantum mechanics approach was studied in didactic books, which was found to be insufficient, asserting the need to develop a specific material. This, in turn, was applied in a pedagogical laboratory to the students, through a didactic sequence. The results were analyzed based on three moments: in the initial probing of the pre-test, the students showed little knowledge about the prerequisites necessary for the study of quantum mechanics. The operational exercise, carried out after the didactic interventions, allowed to verify considerable advances regarding the new concepts assimilated and the mathematical language used. And two months after the conclusion of the didactic sequence, a post-test questionnaire showed that most of the students were still able to discuss in a coherent way the ideas approached throughout the didactic intervention. In summary, it was found that the developed educational product, although prone to future improvements, proved to be a potential tool for the mechanics approach in high school classes, considering what was presented by the students at the end of the didactic process.

Keywords: Quantum mechanics. Didactic transposition. Teaching with analogies.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	REFERENCIAL TEÓRICO	11
2.1	APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA	11
2.2	ENSINO COM ANALOGIAS	14
3	METODOLOGIA	17
3.1	CRIAÇÃO DO PROJETO-PILOTO	18
3.2	ORGANIZADORES PRÉVIOS	18
3.3	CRIAÇÃO DO KIT “ONDE ESTÁ O GRÃO?”	19
3.4	APRESENTAÇÃO DE POSSÍVEIS ANALOGIAS ENTRE OS MODELOS	20
3.5	VERSÃO DIGITAL DO MODELO ANÁLOGO MACROSCÓPICO	22
3.6	ABORDAGEM DOS TÓPICOS DE MECÂNICA QUÂNTICA	22
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	24
4.1	ENQUETES COM OS PROFESSORES DE FÍSICA DO ENSINO MÉDIO	24
4.2	ANÁLISE DE ALGUNS MATERIAIS INSTRUCCIONAIS DISPONÍVEIS	27
4.2.1	Livros de Física do ensino médio – MEC/PNLD	27
4.2.2	Materiais instrucionais ‘alternativos’	29
4.3	SEQUÊNCIA DIDÁTICA COM OS DISCENTES	31
4.3.1	Averiguação dos conhecimentos prévios	31
4.3.2	O kit visto como um jogo	34
4.3.3	O kit e o ensino por investigação	35
4.3.4	Resultados do exercício operacional	38
4.3.5	Pós-teste	42
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	47
	REFERÊNCIAS	49
	APÊNDICE A - Pré-teste	53
	APÊNDICE B - Exercício de verificação operacional	55
	APÊNDICE C - Pós-teste	57
	APÊNDICE D: Conteúdo da apostila “Onde Está o Grão?”	58

1 INTRODUÇÃO

A mecânica quântica é uma teoria que desde o seu estabelecimento enquanto programa de pesquisa – no sentido lakatosiano do termo – por parte da comunidade científica, na década de 1920, tem logrado considerável êxito ao explicar o comportamento de sistemas nanoscópicos, ou seja, sistemas em escalas de nível atômico-molecular. Os objetos vistos macroscopicamente são, de fato, resultados da ação individual de seus átomos, assim como afirma Penrose (1998, p. 70), “Um evento quântico de pequena escala desencadeia algo maior, que pode realmente ser visto no nível clássico”. Conhecer como esses menores constituintes da matéria comportam-se é essencial para o desenvolvimento de novas tecnologias, as quais os estudantes lidam diariamente, por exemplo, ao observar as luzes de *led* de um semáforo, ao gravar um arquivo do computador em um *pen drive* ou quando tem o código de barras de uma mercadoria escaneado no momento de uma compra. São tecnologias capazes de proporcionar economia, durabilidade, praticidade, conforto e segurança.

É preciso transformar o ensino de Física tradicionalmente oferecido por nossas escolas em um ensino que contemple o desenvolvimento da Física Moderna, não como uma mera curiosidade, mas como uma Física que surge para explicar fenômenos que a Física Clássica não explica, constituindo uma nova visão de mundo. (PINTO e ZANETIC, 1999, p. 7)

Como ponto de partida para o desenvolvimento deste trabalho, três indagações foram fundamentais:

- I. Como a mecânica quântica é abordada em livros didáticos de Física do ensino médio?
- II. O professor de Física do ensino médio encontra-se capacitado a lecionar mecânica quântica?
- III. O professor de Física do ensino médio dispõe de algum material didático específico para ministrar aulas sobre mecânica quântica?

Como conteúdo programático do ensino médio, verifica-se que a teoria geral que constitui a fundamentação teórica de tais tecnologias, a mecânica quântica, ainda encontra-se distante da sala de aula. Não é alvo deste trabalho a discussão das causas dessa exclusão, mas sim a elaboração de uma breve proposta para aproximar o estudante do ensino médio e essa teoria. Essa proposta reconhece no professor uma peça fundamental no processo ensino-aprendizagem, de modo que visa oferecer-lhe, através de um *kit* de testes de probabilidade, uma ferramenta eficaz para a realização de aulas dinâmicas e compreensíveis sobre introdução à mecânica quântica.

Após realização de análise em livros didáticos de Física do ensino médio e enquetes feitas com professores de física desse nível de ensino, dois objetivos foram definidos como fundamentais:

- Elaborar uma apostila sobre mecânica quântica onde o professor de Física possa aprimorar seus conhecimentos a respeito do tema e trabalhá-lo em sala de aula.
- Desenvolver um material potencialmente significativo para que o estudante aprenda conceitos de mecânica quântica através de atividade prática.

A estrutura desse trabalho parte da apresentação das idéias de David Ausubel sobre aprendizagem significativa e de Shawn Glynn sobre o ensino através de analogias. Na seção destinada à metodologia, descreve-se a sequência de procedimentos adotados junto aos estudantes, que possibilitaram o aperfeiçoamento do produto educacional desenvolvido. Posteriormente, discutem-se os resultados obtidos com a utilização do produto, destacando seus êxitos, falhas e limitações. Ao final, a conclusão apresenta as considerações finais, ressaltando as vantagens da empregabilidade do produto mediante as dificuldades encontradas durante os testes realizados e lançando perspectivas de continuidade e aprofundamento de estudo. O APÊNDICE D é seção fundamental para a total compreensão deste trabalho, apresentando de forma completa a apostila que compõe parte de um produto educacional, onde constam: o processo de confecção do *kit*, seu manuseio, os temas de mecânica quântica a ele relacionados e a linguagem matemática adotada. O produto educacional apresenta índice e referências bibliográficas próprias. Tratando-se de um estudo introdutório sobre mecânica quântica, apenas os temas considerados mais relevantes e possíveis de serem discutidos com a instrumentação adotada foram tratados. Conforme o planejamento (ainda em andamento), espera-se que a inserção de novas ferramentas como a matemática computacional e as aplicações tecnológicas, possibilitem a incorporação de novos temas de mecânica quântica a esse estudo.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste trabalho, busca-se abordar a mecânica quântica conciliada aos fundamentos da aprendizagem significativa, adotando-se como principal estratégia de ensino o uso de analogias. Optou-se pela mecânica matricial considerando que, sendo este conteúdo parte da matriz curricular obrigatória de matemática do ensino básico, os estudantes no terceiro ano do ensino médio devam possuir o domínio e a compreensão necessários acerca dos recursos matemáticos utilizados nesta proposta didática. Este capítulo dedica-se à discussão dos preceitos da aprendizagem significativa estabelecidos por David Ausubel e o modelo *TWA* (*Teaching With Analogies*) proposto por Shawn Glynn. Os tópicos de mecânica quântica necessários ao desenvolvimento deste trabalho encontram-se no Capítulo 3 do produto educacional disposto na íntegra no APÊNDICE D, que acompanha o *kit* de teste que será apresentado posteriormente.

2.1 APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA

Esta seção está integralmente fundamentada em Moreira (2011), obra elaborada a partir de uma coletânea de artigos sobre a teoria da aprendizagem significativa. Essa teoria, proposta por David Ausubel em 1963 e, posteriormente, revista por ele próprio em 2000, propõe que o estudante aprende, de fato, quando dá significado a novos conhecimentos através da interação com conhecimentos previamente estabelecidos. Para que isso se concretize, duas condições são necessárias:

- a) O material de aprendizagem necessita ser potencialmente significativo.
- b) O estudante deve estar predisposto a aprender.

O advérbio “potencialmente” implica que o material apenas é capaz de ser significativo, ou seja, não existe um material significativo de fato, pois quem atribui o significado é o estudante. Tal material pode ser um livro, uma lista de exercício, um vídeo, um *kit* de experimentos, um jogo, etc., porém, por mais claro e bem elaborado que ele seja, sua eficácia será sempre relativa, pois depende de um intercâmbio de significados concatenados pelo estudante. Quanto à segunda condição, a predisposição do estudante em aprender não deve ser entendida apenas como motivação ou gosto pelo conteúdo ensinado, mas sim em apresentar condições de relacionar os novos conceitos à sua estrutura cognitiva prévia, adaptando-a e dando significados a esses novos conhecimentos. Caso o estudante não

ofereça tal predisposição, a primeira condição, a de que o material deve ser potencialmente significativo deve ser revista.

Ainda com relação à estrutura cognitiva prévia do estudante, Ausubel emprega o termo *ancoragem* como metáfora do processo de aquisição significativa de novos conhecimentos. As novas ideias apresentadas simbolicamente ao estudante se ancoram em conhecimentos preexistentes chamados *subsunçores* e recebem devido significado através de uma relação não-litera e não-arbitrária. Entende-se *não-litera* como “não ao pé da letra”, ou seja, um estudante pode memorizar as leis de Newton e aplicá-las em alguma situação-problema sem que com isso seja capaz de discutir com suas próprias palavras essas leis. Por *não-arbitrária* indica a interação, não com qualquer conhecimento prévio, mas com um conhecimento especificamente relevante que servirá de base para a aquisição de novos conhecimentos. Assim, caso o conceito de campos vetoriais esteja (previamente) bem consolidado na estrutura cognitiva de um estudante, este servirá de base para aquisição de novo conceitos tais como o de campo elétrico, magnético, gravitacional, dentre outros. Neste caso, a aprendizagem dos campos previamente citados (elétrico, magnético e gravitacional) estará *subordinada* ao de campos vetoriais, sendo este último mais geral e inclusivo. Mas não há necessidade que a aprendizagem seja sempre assim, por subordinação. Podem ocorrer – e na prática parece ser essa a regra – casos em que o aluno estuda campo elétrico e campo magnético (em física III), campo gravitacional em (física II), de maneira ‘arbitrária’, ou seja, sem se dar conta, inicialmente, que todos fazem parte de um mesmo campo conceitual: são todos casos particulares de campos vetoriais vistos em curso de cálculo III. Contudo, apesar de não ocorrer com tanta freqüência, alguns estudantes acabam percebendo, com o tempo, que os campos outrora estudados formam um todo conceitual e coerente. Isso ocorre quando o mesmo percebe que os campos outrora estudados em cursos de física são casos específicos do que foi visto em cálculo III, com este último passando a ter status de teoria geral. Essas ‘ligações’ por meio de um raciocínio indutivo entre os diferentes tipos de campos chegando a um conceito mais geral de campos vetoriais é chamada de aprendizagem *superordenada*. Segundo Moreira (2011, p. 37), “A aprendizagem superordenada envolve, então, processos de abstração, indução, síntese, que levam a novos conhecimentos que passam a subordinar aqueles que lhes deram origem.”

Embora a ideia de ancoragem possa remeter à ideia de “amarração”, o que pressupõe imposição ao movimento, aqui, ela deve ser compreendida como “conexão”, pois trata-se de um processo dinâmico de assimilação. Os subsunçores, ao interagirem com um novo conhecimento, acabam sendo aprimorados e adquirindo novos significados, possibilitando

novas concepções. Como forma de entender a relação entre o conceito novo e os subsunçores, pode-se pensar no exemplo de como o conceito de hidrogênio pode interagir com os subsunçores:

- *Conceito novo:*

Hidrogênio → elemento químico de número atômico 1.

- *Subsunçores:*

Elemento químico → conjunto de átomos que possuem o mesmo número de prótons em seu núcleo.

Número atômico → termo que designa o número de prótons de um elemento químico.

- *Significado após interação entre o conceito novo e os subsunçores:*

Hidrogênio → elemento químico que possui um próton em seu núcleo.

Apesar de muitos professores reconhecerem a eficácia dos princípios da aprendizagem significativa, o que ocorre regularmente nas escolas é a *aprendizagem mecânica*, caracterizada pelo armazenamento literal, arbitrário e sem significado de conteúdos, restringindo-se apenas a meras aplicações mecânicas em situações conhecidas. A aprendizagem mecânica se estabelece por diversos fatores que permeiam a rotina de uma sala de aula, dentre eles, a metodologia conteudista que privilegia uma gama acentuada de informações em detrimento da qualidade do ensino. Mas essa aprendizagem é efêmera, sendo esquecida pouco tempo após o momento em que ela é exigida. Isso não implica dizer que na aprendizagem significativa também não haja esquecimento, pois se trata de uma consequência natural na estrutura cognitiva. Ausubel chamou de *assimilação obliteradora* a perda gradual da dissociabilidade de conceitos novos em relação àqueles conceitos que adquiriram significados, no entanto, diferentemente da aprendizagem mecânica, na aprendizagem significativa o esquecimento é residual, ou seja, o conhecimento esquecido permanece “dentro” do subsunçor tornando mais fácil sua reaprendizagem. É preciso, porém, salientar que em determinadas situações a aprendizagem mecânica e a aprendizagem significativa caminham em paralelo dentro de um mesmo processo. Por exemplo, quando se propõe aos estudantes admitirem que a carga elétrica do elétron é negativa e a do próton, positiva. Essa espécie de aceitação torna-se essencial para que outros conhecimentos acerca da eletricidade possam ser ancorados.

Diante do exposto no parágrafo anterior, é comum o estudante não dispor dos subsunçores adequados a lhe permitir atribuir significados aos novos conceitos. Como proceder nestes casos, é uma questão legítima e tem como resposta duas possibilidades.

Embora a aprendizagem significativa deva ser preferida à mecânica por facilitar a aquisição de significados, a retenção e a transferência de aprendizagem, **pode ocorrer que em certas situações a aprendizagem mecânica seja, desejável ou necessária: por exemplo, em uma fase inicial da aquisição de um novo corpo de conhecimento.** (MOREIRA, 2009, p. 9)

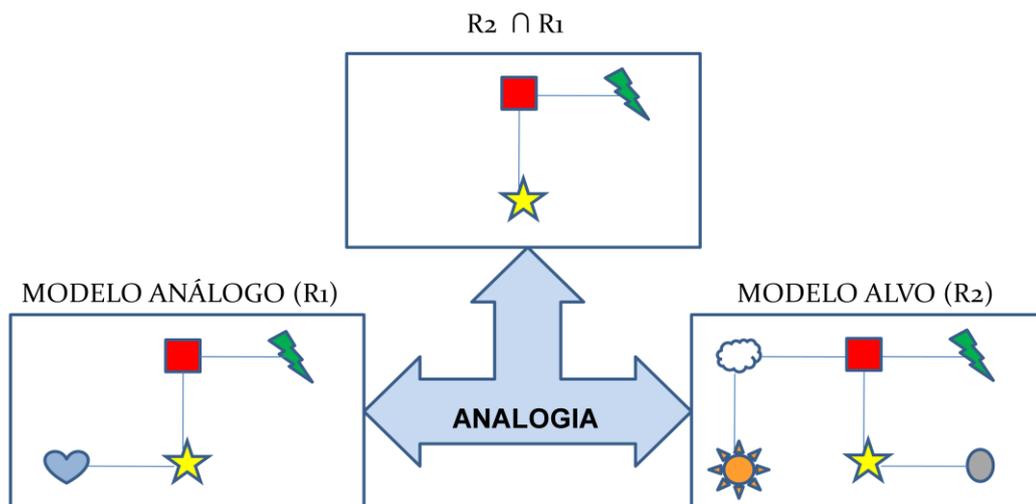
No segundo caso pode-se utilizar os *organizadores prévios* que são recursos instrucionais capazes de agir em caso de insuficiência de subsunçores e cuja função é conectar aquilo que o estudante já sabe ao que ele necessita saber, em outras palavras, manipular a estrutura cognitiva para promover a aprendizagem significativa. Um organizador prévio pode ser uma situação-problema, uma leitura introdutória, um desenho, a demonstração de um experimento, uma aula, etc., no entanto, uma condição deve ser observada: ele deve preceder o material de aprendizagem e ser mais abrangente que este e servir como “*ponte cognitiva*” para a aquisição de um novo conhecimento. Dito de outra forma, um organizador prévio serve para explicitar uma relação entre os novos conhecimentos com aqueles que o estudante já tem, mas não percebe que são relacionáveis aos novos. É uma estratégia que pode ser usada, sobretudo, quando o novo conhecimento é totalmente não-familiar ao estudante visto que, nela podemos nos valer daquilo que o aprendiz já sabe em outras áreas do conhecimento, a fim de suprir a ausência de conceitos, idéias e proposições para ancorarmos esse novo conhecimento (Moreira, 2011). Dentro dessa perspectiva - de um novo conhecimento altamente não-familiar - vemos que o ensino com analogias pode vir a ser uma importante ferramenta para a ‘formulação’ dos organizadores prévios necessários para se ancorar conceitos em mecânica quântica. É nessa perspectiva que este trabalho se enquadra e, por tal motivo, uma breve explanação será feita posteriormente sobre modelos de ensino com analogias.

2.2 ENSINO COM ANALOGIAS

As analogias constituem uma importante ferramenta de ensino e frequentemente são usadas por professores de forma natural, pois é percebida como uma oportunidade rica e eficaz de proporcionar a aprendizagem de conceitos complexos e não-familiares. Segundo Almeida e Lorencini Júnior (2016), vários métodos de ensino com analogias têm sido

desenvolvidos ao longo do tempo, dentre eles: o *GMAT – General Model of Analogy Teaching*, de Zeitoun, em 1984, o *MECA – Modelo de Ensino Com Analogia*, de Nagem, Carvalhães e Dias, em 2001, e o *TWA - Teaching With Analogies*, de Glynn, em 1991, sendo este último a principal referência do ensino por analogia. Duit (1991) afirma que as analogias são úteis para estabelecer conexões entre um domínio conhecido e um desconhecido, entre um abstrato e um concreto, entre um observável e um não-observável, entre um familiar e um não-familiar. Assim, no âmbito da aprendizagem significativa, tais ferramentas podem ser valiosas na formulação de organizadores prévios. No diagrama da Figura 1, a analogia representa a correlação entre o modelo análogo (R_1) e o modelo alvo (R_2), possibilitando identificar os elementos em intersecção ($R_1 \cap R_2$) e utilizá-los de forma significativa no processo de ensino-aprendizagem.

Figura 1 – Esquema representativo da analogia através de diagrama.



Fonte: O Autor, 2017

No entanto, Glynn (1994) ressalta que analogias empregadas inapropriadamente podem desenvolver compreensões equivocadas acerca do conceito-alvo, necessitando, portanto, de um planejamento prévio para sua aplicação. Suas análises baseadas em trabalhos desenvolvidos a partir de aulas de professores e de livros didáticos permitiram-lhe sistematizar o modelo *TWA* em seis procedimentos básicos que compõem o núcleo de seu modelo:

- 1) Introdução ao modelo-alvo.
- 2) Proposição da analogia entre conceitos.
- 3) Identificação dos aspectos relevantes entre o modelo-alvo e o análogo.

- 4) Mapeamento das similaridades entre o modelo-alvo e o análogo.
- 5) Identificação de possíveis falhas e limitações na analogia.
- 6) Extrair conclusões.

Diante da não-familiaridade dos modelos em sistemas quânticos, o *TWA* de Glynn apresenta-se como uma interessante estratégia capaz de promover o ensino de conceitos de Mecânica Quântica e possibilitar aos estudantes uma aprendizagem significativa. Para tal, neste trabalho, foi desenvolvido um sistema análogo, com o intuito de discutir conceitos de mecânica quântica. No entanto, ressalta-se que os testes desenvolvidos no projeto-piloto com os estudantes, não seguiram à risca os passos de Glynn, pois o objetivo não era testar a eficácia do modelo *TWA*, mas sim propor um material instrucional baseado nessa estratégia (analogias-organizador prévio) para que o professor possa utilizá-lo em sala de aula, conforme será descrito adiante na metodologia.

3 METODOLOGIA

O percurso metodológico desse trabalho consiste em três etapas, cada uma envolvendo diferentes ‘atores’ (docentes, discentes e materiais) acerca da inserção da mecânica quântica no ensino médio: o docente, os materiais instrucionais disponíveis, a descrição do material instrucional proposto neste trabalho e por fim os resultados de uma sequência de ensino com discentes, valendo-se deste último. Em relação aos docentes, foi realizada uma sondagem sobre a mecânica quântica em sua formação e na sua atuação profissional. Já em relação aos materiais instrucionais, dois levantamentos foram realizados: (i) livros didáticos disponibilizados pelo MEC via PNLD; (ii) materiais paradidáticos tais como livros e dissertações. Realizadas essas duas etapas, confeccionou-se um produto educacional e, de posse do mesmo, uma sequência de ensino foi realizada com discentes de uma escola estadual localizada na cidade de São Lourenço da Mata, em Pernambuco. A seguir essa proposta será detalhada deixando as análises da enquete, dos materiais disponíveis e dos resultados com os discentes no capítulo 4.

Salienta-se que a preparação para a abordagem dos conceitos de mecânica quântica iniciou-se com o planejamento de uma sequência didática que possibilitasse a conciliação dos preceitos da aprendizagem significativa com a utilização de analogias. Para isso, foi criado um projeto-piloto onde um grupo de oito estudantes do terceiro ano do ensino médio, em oito encontros de noventa minutos cada, submeteu-se a sucessivos procedimentos a fim de testar um material didático de baixo custo intitulado “*Onde está o Grão?*”. Esse material é um *kit* de testes probabilísticos em versão física e digital. A sequência foi desenvolvida da seguinte maneira:

1º encontro – Pré-teste.

2º encontro – Aula expositiva sobre modelos atômicos e ligações atômicas.

3º encontro – Aula expositiva sobre matrizes.

4º encontro – Apresentação e manuseio do *kit* (modelo análogo macroscópico).

5º encontro – Aula expositiva sobre as analogias entre o modelo macroscópico e o modelo alvo e apresentação da versão digital do modelo macroscópico.

6º e 7º encontros – Aula sobre introdução à Mecânica Quântica.

8º encontro – Aplicação de exercício operacional sobre Mecânica Quântica.

9º encontro – Pós-teste.

A seguir, serão discutidas: a composição desse material, suas funcionalidades e as situações didáticas¹ adotadas ao longo dos encontros.

3.1 CRIAÇÃO DO PROJETO-PILOTO

Para os testes necessários ao desenvolvimento do material didático, foi criado um grupo de oito estudantes do terceiro ano da Escola de Referência em Ensino Médio Conde Pereira Carneiro, localizada no município de São Lourenço da Mata, Pernambuco. Não se estabeleceram critérios de seleção para a composição do grupo, sendo este formado por estudantes voluntários e cientes de tratar-se de uma atividade extracurricular, em horário extra e sem efeito de pontuação no boletim escolar. Desde o início os estudantes foram conscientizados de que participariam de um laboratório pedagógico para o desenvolvimento de uma atividade acadêmica e se mantiveram cooperativos ao longo de todo o processo. A opção de desenvolver um trabalho em horário extra à jornada letiva diária dos estudantes deveu-se ao fato do estudo da mecânica quântica não pertencer ao conteúdo programático de física na referida instituição de ensino, o que comprometeria o planejamento bimestral dos conteúdos exigidos.

3.2 ORGANIZADORES PRÉVIOS

Conforme mencionado na seção 2.1, é comum o aprendiz não possuir os subsunçores e a linguagem matemática necessária para a ancoragem de novos conhecimentos. Segundo Ausubel, essa necessidade pode ser suprida com a utilização dos organizadores prévios que, em suma, são recursos instrucionais apresentados em alto grau de abstração, generalidade e inclusividade em relação ao material de aprendizagem adotado. De acordo com Moreira (2011), os organizadores prévios podem tanto servir como “pontes cognitivas”, ligando ideias preexistentes a novas ideias, como auxiliando no estabelecimento de subsunçores. Adotaram-se como organizadores prévios: aulas expositivas com o recurso do projetor de *slides* e exercício de fixação.

A implementação dos organizadores prévios ocorreu a partir do segundo encontro com o grupo, com duração de uma hora e meia, onde foram revisados os modelos atômicos,

¹ Situação didática é a denominação dada por Brousseau (1996) ao conjunto de relações pedagógicas entre o professor, os alunos e o saber, capaz de propiciar, através de materiais ou instrumentos, a construção do conhecimento desejado.

passando pela distribuição eletrônica e ligações covalentes. No terceiro encontro foram discutidos problemas de probabilidade, classificação das matrizes e operações matriciais.

3.3 CRIAÇÃO DO *KIT* “ONDE ESTÁ O GRÃO?”

Considerando a pouca compreensão sobre ligações atômicas demonstrada pelos estudantes através do questionário de pré-teste, foi criado um material potencialmente significativo, intitulado “Onde Está o Grão?”, para auxiliar na assimilação desses conceitos. Esse material é um modelo macroscópico análogo a um modelo quântico de elétrons em átomos ligados em uma molécula, que ser utilizado para obter dados estatísticos e servir como modelo análogo macroscópico ao modelo quântico. Esse modelo é um *kit* experimental que pode ser confeccionado com materiais de baixo custo e de fácil aquisição. Posteriormente, desenvolveu-se uma versão digital desse modelo análogo macroscópico para uso em *smartphone*. Em sua versão física, esse *kit* é composto por uma caixinha de papelão (embalagem de creme dental), grãos-de-bico e tiras de papel coloridas dispostas sobre uma mesa e cobertas por uma camada plástica transparente de papel *contact* (Figura 2).

Figura 2 – Foto da versão física do *kit* “Onde está o Grão?” (modelo análogo) confeccionado pelos estudantes, com a caixinha, os grãos e as tiras de papel coloridas sob uma camada de papel *contact*. Identificam-se os três modelos de tira: “A”, com duas regiões de áreas iguais; “B”, com regiões de áreas na razão 1:2; e “C”, com três regiões de áreas iguais.



Fonte: O Autor, 2017

O *kit* “Onde Está o Grão?”, em sua versão física, foi apresentado aos estudantes do projeto no quarto encontro, momento em que o professor explicou com detalhes os procedimentos para manuseio. Foi solicitado a cada grupo de estudantes que executasse cem sorteios para a localização do grão em cada uma das tiras para posterior obtenção dos dados de frequência relativa. Os detalhes de manuseio do *kit* e sua montagem estão descritos no

APÊNDICE D, no Capítulo 1 da apostila que compõe parte do produto educacional. Concluídas as seções de testes com a versão física do *kit*, utilizou-se o recurso do *datashow* para apresentar aos estudantes as possíveis analogias entre o modelo macroscópico do grão dentro da caixa e o modelo quântico do elétron em átomos ligados.

3.4 APRESENTAÇÃO DE POSSÍVEIS ANALOGIAS ENTRE OS MODELOS

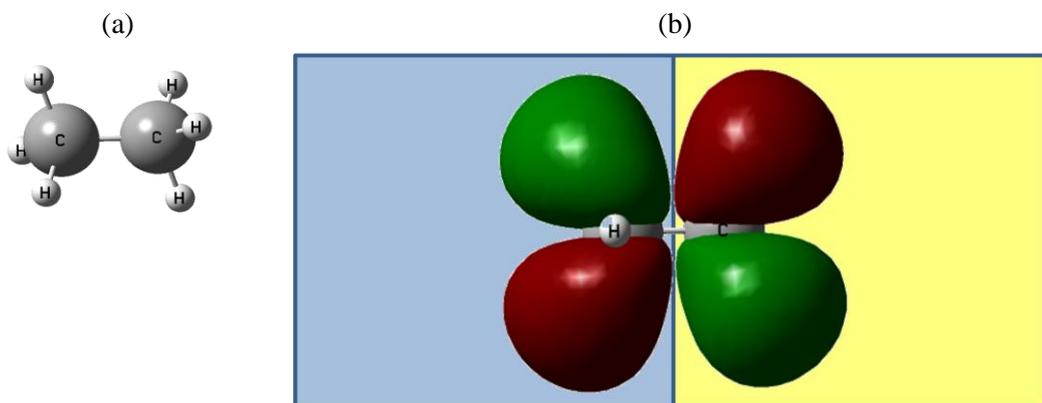
No quinto encontro foram apresentadas aos estudantes, com o recurso do projetor de *slides*, as analogias entre o modelo clássico do grão dentro da caixinha sobre a tira e o modelo quântico de elétrons em átomos ligados de uma molécula. Os trabalhos desenvolvidos no projeto-piloto não seguiram, a rigor, o passo a passo dos métodos de Glynn. Verificaram-se apenas as possíveis analogias que podem ser obtidas com o modelo análogo macroscópico e se elas, de fato, auxiliam os estudantes na compreensão do modelo alvo. A seguir são apresentadas como exemplos de analogias. A relação completa das analogias apresentadas aos estudantes, bem como as limitações do modelo análogo, encontram-se no APÊNDICE D, no Capítulo 3 da apostila.

1º Exemplo:

Os grãos movimentam-se dentro da caixinha submetidos a um potencial gravitacional uniforme, sendo compartilhados por todas as regiões demarcadas, assim como elétrons movimentam-se submetidos a um potencial coulombiano não uniforme, sendo compartilhados por átomos ligados em uma molécula. A Figura 3(a) corresponde ao esquema de uma molécula de etano. A Figura 3(b) mostra a sobreposição da imagem da tira modelo *A* e a imagem do modelo quântico da molécula de etano com um de seus orbitais.² As cores verde e vermelha do orbital representam fases. Observa-se que cada região colorida da tira de papel está associada a um átomo de carbono (ligado a três de hidrogênios) da molécula. Um grão agitado sobre essa tira apresenta a mesma probabilidade de encontrar-se do lado azul ou do lado amarelo. A localização do grão em cada cor da tira corresponde a um vetor da base do sistema análogo.

² Figura elaborada com auxílio do *software Gauss View 3.07*. As cores verde e vermelha do orbital representam a diferença de fases.

Figura 3 – (a) Esquema de uma molécula de etano. (b) Associação entre a tira modelo A e um dos orbitais da molécula de etano ocupado.

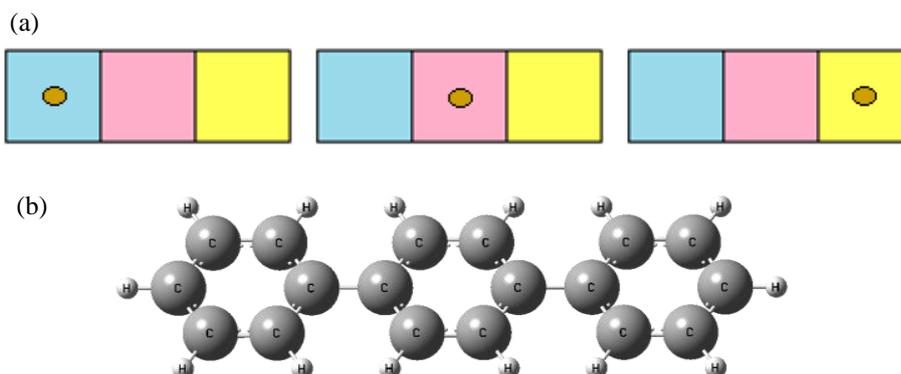


Fonte: O Autor, 2017

2º Exemplo:

O estado geral desse sistema corresponde à combinação linear dos estados possíveis, representados pelos vetores da base. De modo análogo, a localização espacial de um elétron numa molécula corresponde a um estado quântico formado pela combinação linear de vetores de uma base. Se o grão for agitado pela caixinha sobre uma tira de papel modelo C, por exemplo, há três possibilidades de localização, como mostra a Figura 4(a), similarmente a um elétron compartilhado pelos átomos de carbono ligados em uma molécula de trifênilo, Figura 4(b), indicando três estados possíveis para o sistema. Nota-se que o grupo central possui um átomo de hidrogênio a menos, contudo, como ele é muito menor que um carbono, é possível desprezá-lo e considerar apenas os carbonos.

Figura 4 – (a) Desenhos das três possíveis localizações de um grão na tira modelo C. (b) Esquema de uma molécula de trifênilo.



Fonte: O Autor, 2017

3ª Exemplo:

A posição do grão só é conhecida quando a caixinha é erguida para que se possa observá-lo. Esta ação define uma medição realizada, assim como a posição de um elétron em uma molécula só é conhecida realizando-se uma medição. No momento da realização da medição ocorre a redução de estados, pois o sistema passa de uma combinação para um único estado. De acordo com Pessoa Júnior (2003) há várias interpretações para o fenômeno da redução de estado: ondulatória, corpuscular, dualista realista e da complementaridade, às quais são apresentadas na seção 4.4 da apostila que compõe o produto educacional juntamente com o *kit* probabilístico.

3.5 VERSÃO DIGITAL DO MODELO ANÁLOGO MACROSCÓPICO

Embora o modelo macroscópico tenha atendido às expectativas de promover a aprendizagem através de uma atividade lúdica e possibilitar diversas analogias com o modelo alvo, como forma de agregar-lhe tecnologia, idealizou-se uma versão digital para simular, através de *smartphone*, o movimento do grão dentro da caixinha. Mesmo não sendo um aparelho de baixo custo, de acordo com pesquisa divulgada em versão *online* de Exame (2014), 78% dos jovens brasileiros usam *smartphone*. Dos oito estudantes do projeto, sete possuíam esse tipo de aparelho, o que tornou viável aplicar esse novo formato ao modelo macroscópico.

A eficácia dessa nova versão foi testada no quinto encontro com os estudantes do projeto e consiste em um *gif* animado simulando o movimento do grão entre as regiões da tira. Seu funcionamento se dá mediante a utilização de um aplicativo leitor de *gif* que permite ativar e pausar a animação com um toque na tela do *smartphone*. Todos os detalhes sobre como confeccionar e manusear a versão digital do modelo macroscópico encontra-se no APÊNDICE D, Capítulo 1 da apostila.

3.6 ABORDAGEM DOS TÓPICOS DE MECÂNICA QUÂNTICA

Com uso de um projetor de *slides*, uma aula expositiva sobre introdução à mecânica quântica foi realizada no sexto e sétimo encontro com os estudantes do projeto. Durante a aula, foram citadas algumas tecnologias desenvolvidas a partir dos estudos nesse campo da Física, como os LED, lasers, transistores e placas fotovoltaicas. Posteriormente, discutiram-se os seguintes tópicos: princípio da complementaridade, estados quânticos, princípio da

superposição de estados, redução de estados, indistinguibilidade e degenerescência, ortonormalidade, observáveis e operadores, autovalores e autovetores. O teor da abordagem desses tópicos está disponível no Capítulo 4 da apostila, no APÊNDICE D.

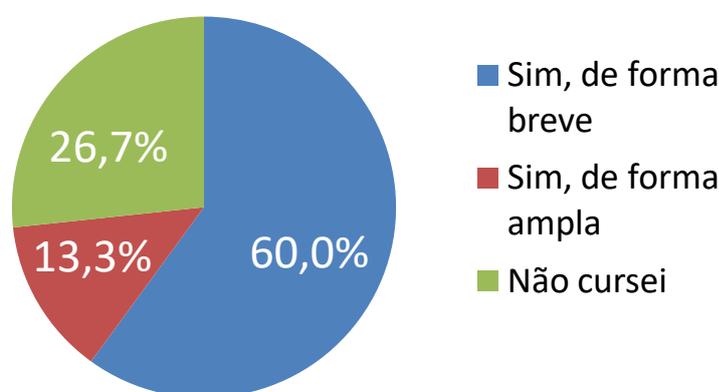
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 ENQUETES COM PROFESSORES DE FÍSICA DO ENSINO MÉDIO

Considerando que o professor exerce papel fundamental na inserção do estudo da Mecânica Quântica em turmas do ensino médio, quatro enquetes foram realizadas por intermédio da ferramenta *Google Docs*, com quinze professores de Física, de escolas públicas e particulares, contatados via internet por intermédio da ferramenta *Google Docs*. Os resultados das enquetes são descritos a seguir nos Gráficos de 1 a 4.

Gráfico 1 – Primeira enquete realizada com os professores.

Você cursou mecânica quântica durante a graduação?



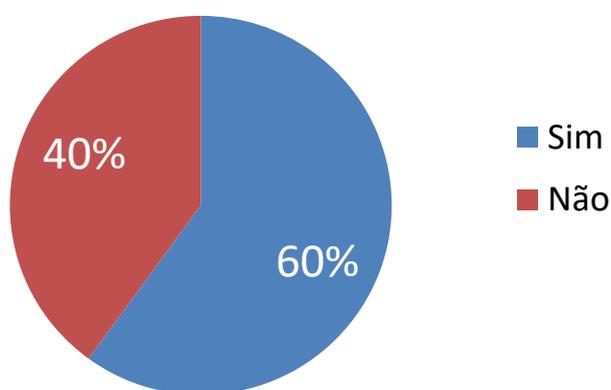
Fonte: O Autor, 2017

Quando questionados sobre ter cursado mecânica quântica no ensino superior, 60% dos professores consultados revelaram tê-la cursado apenas de forma breve, ou seja, sem aprofundamento, e 26,7% afirmam não ter cursado. Esses números indicam uma ampla maioria de professores que concluem seu curso de graduação sem o amplo estudo da mecânica quântica, o que induz esse profissional a não ministrar aulas sobre o assunto. É válido destacar que um dos fatores que justificam esse resultado é o fato de alguns professores de física do ensino médio não terem formação específica, mas sim em outros cursos, como

matemática e diversas engenharias. Conforme Saldaña (2017), quase 50% dos professores do ensino básico não têm formação na matéria que ensinam e a Física se destaca como a matéria em que isso mais ocorre.

Gráfico 2 – Segunda enquete realizada com os professores.

Você se sente capacitado a ministrar aulas sobre Mecânica Quântica em turmas do Ensino Médio?

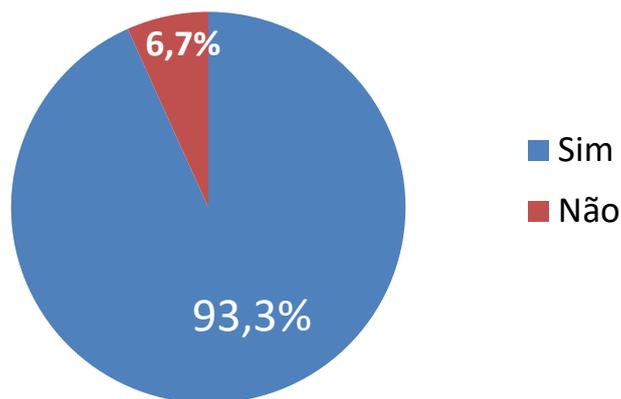


O Autor, 2017

Neste item, 40% dos professores revelaram não se sentirem capacitados a ministrar aulas sobre mecânica quântica em turmas do ensino médio. É possível associar esse resultado com o resultado do primeiro questionamento, onde um número significativo de professores alega não ter cursado Mecânica Quântica de forma ampla durante a graduação, enquanto alguns nem cursaram. Embora a enquete não questione a qualidade do ensino das instituições formadoras, Nardi (2009, p. 154) afirma que “Em relação ao contexto das aulas de mecânica quântica, percebe-se que o sujeito do conhecimento não é o foco dos professores formadores”. Em outras palavras, a forma como a mecânica quântica é abordada para professores graduandos ao longo de sua formação, não foca o aprimoramento desses profissionais para a transmissão dessas informações aos estudantes do ensino médio. Também é fator complicador a ser citado, a lacuna existente nos livros didáticos de Física, do ensino médio, no que concerne à mecânica quântica, conforme análise apresentada na próxima seção.

Gráfico 3 – Terceira enquete realizada com os professores.

Você acha válido apresentar tópicos de Mecânica Quântica em turmas do Ensino Médio?



Fonte: O Autor, 2017

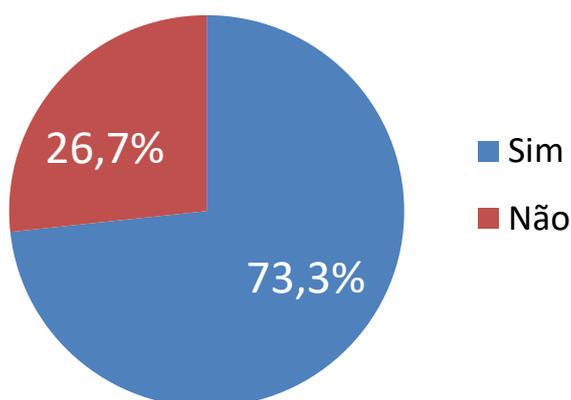
O resultado do terceiro questionamento evidencia que 93,3% dos professores consultados consideram importante apresentar tópicos de mecânica quântica em turmas do ensino médio, sendo possível presumir que eles percebem o avanço tecnológico ao qual o estudante se depara diariamente e o quanto a mecânica quântica está inserida nesse esse avanço. Sobre a atualização do currículo de Física do ensino médio e sobre a inserção de temas contemporâneos, Ostermann e Moreira (2001) afirmam que:

É viável ensinar Física Contemporânea no Ensino Médio, tanto do ponto de vista de atitudes quanto de conceitos. É um engano dizer que os alunos não têm capacidade de aprender tópicos atuais. A questão é como abordar tais tópicos. [...] Analogias são importantes [...]. (p. 11)

Portanto, se o estudo da mecânica quântica ainda não está inserido no conteúdo programático das escolas, é por fatores alheios à capacidade cognitiva dos estudantes. Isso reforça a necessidade de promover meios para a devida capacitação do professor nesse campo da física.

Gráfico 4 – Quarta enquete realizada com os professores.

Você dispõe de algum material específico caso pretenda ministrar aulas sobre Mecânica Quântica no Ensino Médio?



Fonte: O Autor, 2017

O quarto questionamento da pesquisa revela que 73,3% dos professores consultados não dispõem de um material didático específico que o permita inserir a mecânica quântica em suas aulas. Como será visto na seção seguinte, nos últimos anos diversos trabalhos sobre a inserção da física moderna e contemporânea no ensino médio têm sido desenvolvidos, no entanto, verifica-se uma tendência dos autores explorarem de forma mais incisiva os tópicos da antiga teoria quântica³, desconsiderando a fase probabilística da mecânica quântica a partir das contribuições de Schrödinger e Heisenberg.

4.2 ANÁLISE DE ALGUNS MATERIAIS INSTRUCIONAIS DISPONÍVEIS

4.2.1 Livros de Física do Ensino Médio – MEC/PNLD.

Para verificar como a mecânica quântica vem sendo discutida por autores de livros didáticos de física, do ensino médio, recorreu-se ao Programa Nacional do Livro Didático

³ Antiga teoria quântica é a denominação usada para os estudos desenvolvidos no campo da Física Quântica até meados de 1925, ano em que Erwin Schroedinger desenvolveu sua teoria da Mecânica Quântica (EISBERG e RESNICK, 1979).

(PNLD), que fornece às escolas públicas brasileiras de nível médio e fundamental, a cada três anos, livros didáticos e outras obras. É requisito para a aprovação no programa, que as obras atendam à proposta dos Parâmetros Curriculares Nacionais (PCN+), no qual o conhecimento em Física seja desenvolvido e norteado através da interdisciplinaridade de seis temas estruturadores, dentre os quais situa-se “Matéria e Radiação”, que abrange a Física Moderna (BRASIL, 2002). Tomaram-se como amostra, três obras aprovadas pelo PNLD 2018, sendo elas de diferentes editoras e de autores já reconhecidos nacionalmente por outras publicações de livros didáticos voltados ao ensino médio (Figura 5).

A primeira obra analisada foi o 3º volume de Torres et al. (2016), da editora Moderna. Com um total de oito capítulos, o 6º possui 24 páginas dedicadas à velha teoria quântica abordando a teoria dos *quanta* de Max Planck, o efeito fotoelétrico, o modelo atômico de Niels Bohr, a dualidade onda-partícula e o princípio da incerteza. Nesse último tópico, menções são feitas a Erwin Schrödinger, como criador da interpretação probabilística da física quântica, e ao conceito de função de onda, porém, de forma muito sucinta. O texto ainda cita Max Born e Paul Dirac como colaboradores dessa nova teoria e destaca a oposição feita por Albert Einstein à interpretação probabilística. Ao final do 6º tópico, os autores propõem uma pesquisa em grupo acerca do efeito túnel. O 7º – e último – tópico resume-se a duas páginas de comentários sobre a nanotecnologia.

Figura 5 – Foto dos livros de Física escolhidos para análise acerca da abordagem da Física Quântica.



Fonte: O Autor, 2017

No 3º volume de Bonjorno et al. (2016), da editora FTD, a física quântica é tratada de forma ainda mais resumida. No 12º capítulo, 11 páginas são dedicadas à antiga teoria quântica, discutindo apenas a radiação do corpo negro, o efeito fotoelétrico, o efeito Compton e a dualidade onda-partícula. Nada se comenta acerca do estudo probabilístico da mecânica quântica ou tecnologias oriundas desse estudo.

O terceiro livro analisado foi o 3º volume de Yamamoto e Fuke (2016), da editora Saraiva. A física quântica ocupa nesta obra o 18º capítulo. Em 22 páginas, são abordados os seguintes temas: radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico, dualidade onda-partícula, princípio da complementaridade, modelo atômico de Niels Bohr, e princípio da incerteza. Assim como nas outras obras analisadas, a velha teoria quântica predomina em todo o capítulo a não ser pelas duas últimas páginas, em que um texto complementar discute a experiência mental do gato de Schrödinger e a ideia de superposição de estados. Portanto, em análise realizada nos três livros didáticos mencionados, constatou-se que pouca relevância é dada ao estudo probabilístico da mecânica quântica, o que permite presumir que os estudantes que vivenciam os temas de física norteados apenas por tais obras, concluem o ensino médio com certa lacuna nesse campo da física moderna.

4.2.2 Materiais instrucionais ‘alternativos’

Ao dar início a este trabalho, foi feita uma breve pesquisa para avaliar a produção recente acerca da inserção da mecânica quântica do ensino médio, encontrando-se alguns artigos, textos de apoio, dissertações e produtos educacionais do MNPEF. Um desses textos, escrito por Webber e Ricci (2006), é feita uma proposta de inserção da mecânica quântica no ensino médio, abordando principalmente a óptica ondulatória. Esse material inicia com um capítulo introdutório sobre o mundo microscópico e o macroscópico e trata da quebra de paradigma a partir do surgimento das ideias de Planck sobre a quantização da luz. A equação de Schrödinger é abordada no segundo capítulo com a utilização de derivadas parciais que, apesar de ampliar o conhecimento do professor que busca se aprimorar por esse material, não está inserida nos conteúdos de matemática do ensino médio.

O MNPEF, promovido pela Sociedade Brasileira de Física (SBF) em parceria com diversas universidades do país, vem, ao longo dos anos, fomentando o meio acadêmico com diversos trabalhos voltados à transposição didática de diversos temas de física, incluindo física quântica. Ávila (2016), por exemplo, foca na utilização de ferramentas diversas como potenciais recursos didáticos para conectar os conteúdos de física quântica com a grade

curricular do ensino médio. O autor propõe, através de seu produto educacional (sequência didática) testado em um curso-piloto, a exposição do conteúdo através do suporte tecnológico de computadores, televisores e projetores. Nota-se nesse produto, a atenção por uma abordagem cronológica desde as discussões de Planck acerca da radiação do corpo negro até o princípio da incerteza de Heisenberg. É possível mencionar ainda outros trabalhos acadêmicos do MNPEF voltados para a inserção da mecânica quântica no ensino médio como, por exemplo, Miranda (2016), que propõe o emprego de unidades de ensino potencialmente significativas, abordando temas desde os princípios da física quântica ao átomo de Bohr, e Paiva (2015), que apresenta como produto educacional uma revista em quadrinhos intitulada “Elétron no mundo quântico” como material complementar para aulas de física quântica no ensino médio. Ainda referente ao MNPEF, é possível encontrar publicações que visam capacitar o professor através de um enfoque diferenciado, como é o caso de Perez (2016), que além de discutir tópicos da velha teoria quântica, explora a mecânica matricial de Heisenberg, em textos objetivos e com ampla discussão conceitual. Além do MNPEF, a SBF tem publicado uma coleção de livros voltados à temática da física moderna e contemporânea, com linguagem acessível inclusive para pessoas que não vivenciam o estudo da Física profissionalmente. Um exemplo disso é Valadares, Chaves e Alves (2005), que discute várias aplicações da física quântica, como diodos, lasers e nanotecnologia, apresentando diversas ilustrações e propostas de experimentos. Outras publicações são voltadas para os estudantes como fazem Chesman, André e Macêdo (2004), que apresentam em seu conteúdo a contextualização história dos fatos concernentes à física quântica, um volume substancial de 350 questões de física moderna e diversos experimentos que podem ser realizados de forma relativamente simples.

Com base na pesquisa literária realizada, verifica-se que muitos dos materiais instrucionais disponíveis: ou visam uma formação continuada dos docentes do ensino básico e, portanto, voltados a esse público, ou abordam o conteúdos voltados ao desenvolvimento histórico (ou ambas). Nesse sentido, a proposta didática que será tratada a seguir converge para uma determinada gama de conceitos abordados pela teoria, mas apresenta um caráter inovador (e complementar às demais propostas) no tocante ao material didático desenvolvido, que possibilitará que o professor desenvolva o estudo da mecânica quântica através de analogias e com uma linguagem matemática acessível ao estudante de nível médio.

4.3 SEQUÊNCIA DIDÁTICA COM OS DISCENTES

4.3.1 Averiguação dos conhecimentos prévios

Segundo a teoria de David Ausubel, uma das condições para uma aprendizagem significativa é que o aprendiz tenha em sua estrutura cognitiva ideias-âncora, as quais ele denomina como *subsunçores*, capazes de lhe permitir dar significados a novos conhecimentos. Segundo Moreira (2011), Ausubel considera o conhecimento prévio como a variável isolada mais importante para a consolidação de uma aprendizagem significativa. Logo, como parte da sequência didática planejada, buscou-se identificar se os estudantes do projeto possuíam os subsunçores necessários à ancoragem de novos conhecimentos. Para isso, foi elaborado um questionário pré-teste como avaliação diagnóstica dos conhecimentos prévios dos estudantes. Esse questionário foi realizado no primeiro encontro do grupo, encontra-se no APÊNDICE A e versa sobre modelos atômicos, ligações atômicas, vetores, probabilidade, matrizes e o conceito de mecânica quântica. O quadro 1 apresenta um resumo das constatações acerca de alguns temas revelados no pré-teste, o que possibilitou projetar futuras ações a serem implantadas no projeto.

Quadro 1 – Resumo dos resultados obtidos através do pré-teste.

Tema	Resultados
Modelos atômicos	Os estudantes, por unanimidade, só reconhecem o átomo através do modelo análogo planetário de Rutherford-Bohr.
Orbital	Os estudantes associam orbital à localização do elétron, mas o confunde com o conceito de órbita.
Ligações atômicas	Os estudantes desconhecem como se processa a ligação entre átomos de uma molécula nem associam tal ligação ao compartilhamento de elétrons.
Vetores	Os estudantes associam o vetor às características módulo, direção e sentido, mas têm dificuldades em exemplificar suas aplicações.
Probabilidade	Apenas metade dos estudantes consegue responder questões de probabilidade, mas ainda assim, de baixo grau de dificuldade.
Matrizes	Os estudantes conseguiram somar e transpor matrizes, mas não souberam efetuar multiplicações. Também desconhecem qualquer empregabilidade para as matrizes.
Mecânica Quântica	Os estudantes associam Mecânica Quântica ao estudo de partículas microscópicas tais como moléculas, átomos, elétrons, etc.

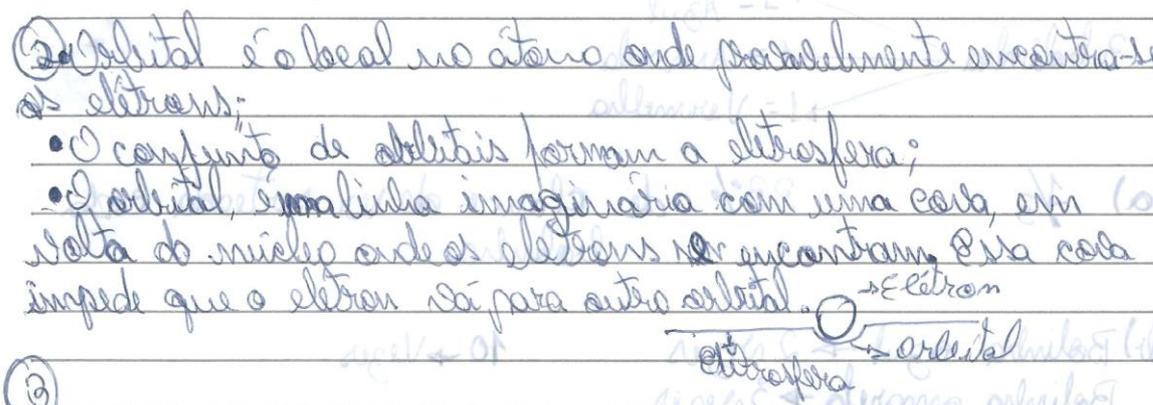
Algumas considerações a respeito do resultado do pré-teste:

- i) O modelo de átomo que os estudantes idealizam é o da velha teoria quântica. Esse modelo, proposto inicialmente por Rutherford, em 1911, e readequado posteriormente por Bohr, em 1913, descreve o átomo dotado de um núcleo composto por prótons e, ao seu redor, elétrons movimentando-se em órbitas circulares. Esta representação de modelo atômico planetário é, inclusive, citada por Moreira (2011, p. 23) como exemplo de obstáculo epistemológico, ao afirmar que “o átomo como um sistema planetário em miniatura também funciona como obstáculo representacional para a aprendizagem da estrutura do átomo na perspectiva da Mecânica Quântica”. Acerca do que aponta a mecânica quântica sobre o modelo atômico, afirma Alcácer (2007):

A teoria pressupõe que os elétrons se movem independentemente uns dos outros no campo do(s) núcleo(s), considerado(s) fixo(s) (aproximação de Born-Oppenheimer), e num campo médio das interações com outros elétrons. A estrutura eletrônica é descrita em termos de um conjunto de orbitais ocupados e orbitais não ocupados (*orbitais virtuais*)⁴, os quais são funções monoelétrônicas. (p. 191)

- ii) Embora os estudantes afirmem que orbital é uma região do átomo onde provavelmente estão localizados os elétrons, eles não idealizam o átomo através de um modelo com orbitais, e sim com órbitas. Isso demonstra que eles compreendem órbita e orbital como o mesmo conceito. Por exemplo, a Figura 6 apresenta a fotografia da resposta dada por um dos estudantes sobre a questão dois do pré-teste, visando explicar que, no seu entendimento, o orbital seria uma “cava”, em outras palavras, uma espécie de vala, permitindo que o elétron nela se movimente sem se deslocar para outros orbitais.

Figura 6 – Trecho digitalizado da resposta de um dos estudantes para a questão dois do pré-teste.



Fonte: O Autor, 2017

⁴ Também chamados de orbitais secundários.

Por desconhecerem o devido conceito de orbital, os estudantes também demonstraram não saber que as ligações entre átomos ocorrem através do compartilhamento de elétrons através dos orbitais. Ao serem solicitados a esboçar um desenho que representasse a ligação entre átomos, aqueles que responderam se limitaram a escrever a fórmula estrutural de alguma molécula, como pode ser visto na Figura 7.

Figura 7 – Trecho digitalizado da resposta de um dos estudantes para a questão três do pré-teste.

3. Uma molécula é formada pela ligação entre dois ou mais átomos. Como você imagina essas ligações? Faça um desenho ilustrando a sua explicação.



Fonte: O Autor, 2017

Este resultado decorre do fato dos estudantes desconhecerem a estrutura atômica através de orbitais, o que os limita a idealizar o processo de ligação atômica de forma intrínseca. No tocante a ausência de conhecimentos prévios acerca dos modelos atômicos, Prates Júnior e Simões Neto (2015) concluem que:

A ideia de átomo como uma pequena entidade que forma a matéria parece ser aceita pelos estudantes, porém, entender a natureza dessas partículas, partes que as compõem, quais as principais características de cada modelo formulado e porque eles são confrontados por outras propostas não fazem parte dos conhecimentos prévios apresentados pelos estudantes. (p. 199)

A ideia de orbital e o compartilhamento de elétrons são subsunçores essenciais para o estudo dos modelos quânticos de elétrons em átomos ligados. Segundo Moreira (2011, p. 31, apud Luiten et al., 1978), “Se o aluno não tem subsunçores relevantes à aprendizagem de novos conhecimentos, o melhor é facilitar, promover, a sua construção antes de prosseguir”. Essa visão corrobora a necessidade da abordagem prévia sobre a ideia de orbitais e ligações atômicas realizada no segundo encontro, antes do prosseguimento da sequência didática.

- iii) Questionados sobre o que conhecem acerca dos vetores, todas as respostas obtidas são unânimes em citar com poucas palavras que o vetor está relacionado a módulo, direção e sentido, conforme a Figura 8.

Figura 8 – Fotografia da resposta de um dos estudantes para a questão quatro do pré-teste.

4. Você já ouviu falar em vetores? Se sim, para que serve um vetor? Cite exemplos onde o vetor pode ser empregado.

Sim, o vetor serve para indicar direção, sentido e módulo.

Fonte: O Autor, 2017

- iv) Os estudantes apresentaram conhecimento insatisfatório sobre probabilidade e matrizes, essenciais à aprendizagem da mecânica quântica. Ressalta-se que a matemática é a linguagem estrutural de diversos conceitos de física e nesse aspecto, Moreira (2011), destaca que:

Segundo Ausubel (1968, p. 82), a aquisição da linguagem é que, em grande parte, permite aos seres humanos a aquisição, por parte da aprendizagem significativa receptiva, de uma vasta quantidade de conceitos e princípios que, por si sós, poderia nunca descobrir ao longo da vida. (p. 62)

Esse resultado indicou a necessidade de uma intervenção para possibilitar a estruturação cognitiva desses estudantes e, conseqüentemente, facilitar a assimilação de conceitos futuros.

4.3.2 O *kit* visto como um jogo

O *kit* “Onde Está o Grão?” foi apresentado aos estudantes no quarto encontro. Naquele momento, o professor demonstrou os procedimentos de manuseio cobrindo um grão com a caixinha e agitando-a sobre a tira modelo A, até cessar o movimento repousando-a sobre essa mesma tira. Em seguida os estudantes foram questionados sobre qual setor da tira (azul ou amarelo) o grão estaria localizado. Como esperado, as opiniões se dividiram. O procedimento foi repetido diversas vezes e a cada teste o desafio de acertar a localização do grão sobre a tira era lançado a fim de estimular a interação dos estudantes, o que os levou, espontaneamente, a

contabilizarem seus acertos, gerando uma disputa, como se o *kit* fora num jogo de adivinhações. Embora esse não tenha sido o propósito da criação do *kit*, percebeu-se que o ambiente recreativo por ele proporcionado contribuiu para o comportamento mais participativo dos estudantes. Esse caráter recreativo é salutar para a prática pedagógica, conforme afirma Kishimoto (1998):

O jogo, visto como recreação, desde os tempos passados, aparece como relaxamento necessário às atividades que exigem esforço físico, intelectual e escolar, tendo como representantes Sócrates, Aristóteles, Sêneca e Tomás de Aquino. (p. 61-62)

Porém, o lúdico não deve prevalecer sobre o didático, sob risco do objetivo final, dos estudantes assimilarem os conceitos desejados, não ser atingido. Essa ressalva, inclusive, é feita no Referencial Curricular Nacional de Educação Infantil (RCNEI), em Brasil (1998):

Pode-se, entretanto, utilizar os jogos, especialmente àqueles que possuem regras, como atividades didáticas. É preciso, porém, que o professor tenha consciência de que as crianças não estão brincando livremente nestas situações pois há objetivos didáticos em questão. (p. 29)

4.3.3 O *kit* e o ensino por investigação

Contabilizados os resultados para dez sorteios realizados com um grão sobre a tira A, dentre o grupo de oito estudantes, aquele que mais acertou a localização do grão, obteve sete acertos, enquanto o estudante com menos acertos, obteve quatro. Os outros estudantes obtiveram cinco ou seis acertos. Essa contagem teve por finalidade tratar do conceito de **regularidade estatística** através do ensino por investigação, visto que o *kit* mostrou-se uma ferramenta com potencial para esse tipo de abordagem sob orientação do professor. Acerca desse método de ensino, Carvalho (2009) o define da seguinte maneira:

Chamamos de demonstrações experimentais investigativas, demonstrações que partem da apresentação de um problema relacionado ao fenômeno a ser estudado e propõem ao aluno uma reflexão acerca desse fenômeno, proporcionando um caráter investigativo a esta atividade. (p. 45)

Após os estudantes arriscarem seus palpites para os dez primeiros sorteios, o professor desenvolveu o seguinte diálogo com o grupo:

Professor: Qual a probabilidade do grão estar na parte azul da tira?

Estudante 1: Cinquenta por cento.

Professor: Os demais concordam com a afirmação do colega?

Grupo de estudantes: Sim.

Professor: E quando estou agitando o grão com a caixinha, qual a probabilidade de cada um de vocês acertar o resultado?

Estudante 2: Cinquenta por cento.

Professor: Vocês concordam com ele?

Grupo de estudantes: Sim.

Professor: Ora, mas se todos têm as mesmas chances de acertar, por que temos um de vocês com sete acertos e outro com apenas quatro? Não deveriam estar todos empatados?

Estudante 3: É sorte.

Estudante 4: Ele (Estudante 1) está com mais sorte, mas continue os sorteios que agora vou começar a acertar.

Professor: Quer dizer que você acha que se eu continuar agitando a caixinha você tem condições de igualar a pontuação do seu colega mesmo ele arriscando palpites junto com você?

Estudante 4: Sim.

Professor: E de quantos sorteios você acha que necessita para conseguir empatar?

Estudante 4: Não sei

Professor: Você sabe o que é frequência relativa?

Estudante 4: Não

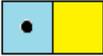
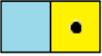
O diálogo permite concluir que o *Estudante 4*, embora desconhecendo as propriedades da frequência relativa, tem a intuição de que, se as condições para cada sorteio forem sempre as mesmas, a realização de mais e mais sorteios lhe propiciará empatar a disputa, pois a probabilidade de acertar o resultado de um sorteio é o mesmo para qualquer estudante. Acerca da *regularidade estatística*, afirma Meyer (1983):

(...) se um experimento for executado um grande número de vezes, a frequência relativa da ocorrência de algum evento *A* tenderá a variar cada vez menos à medida que o número de repetições for aumentado. Essa característica é também conhecida como *regularidade estatística* (p. 17).

Como forma de reforçar que, quando um número extremamente grande de sorteios (amostras) é realizado, a frequência relativa da localização do grão em uma região da tira tende a estabilizar-se num valor muito próximo à probabilidade dessa localização, solicitou-se que os próprios estudantes montassem seus próprios *kits* e executassem os sorteios. A Tabela 4.1 apresenta as frequências relativas para a localização do grão na tira modelo *A* obtidas com os dados de quatro duplas de estudantes. Os estudantes puderam observar que, o acréscimo de

novos resultados aos resultados já computados, a frequência relativa se aproximava do valor teórico da probabilidade (50%), demonstrando a eficácia do modelo macroscópico nesse aspecto.

Tabela 1 – Resultados obtidos pelos alunos para a frequência relativa de um grão na tira modelo A.

	Grão na região azul 	Grão na região amarela 
Localizações em 100 amostras (Resultados da equipe 1)	56	44
Frequência Relativa	$\frac{56}{100} = 56\%$	$\frac{44}{100} = 44\%$
Localizações em 200 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1 e 2)	109	91
Frequência Relativa	$\frac{109}{200} = 54,5\%$	$\frac{91}{200} = 45,5\%$
Localizações em 300 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1, 2 e 3)	158	142
Frequência Relativa	$\frac{158}{300} = 52,7\%$	$\frac{142}{300} = 47,3\%$
Localizações em 400 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1,2,3 e 4)	208	192
Frequência Relativa	$\frac{208}{400} = 52\%$	$\frac{192}{400} = 48\%$

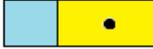
Fonte: O Autor, 2017

Durante o primeiro contato dos estudantes com o *kit*, foi possível observar alguns deles executando movimentos idênticos a cada sorteio, o que apresentava a tendência a um resultado específico. Foi necessária a intervenção do professor para salientar a importância de que o movimento da caixinha ocorresse em diversas direções, a fim de garantir a aleatoriedade dos resultados.

Posteriormente, solicitou-se que os estudantes realizassem o mesmo procedimento com um grão agitado sobre a tira modelo *B*, o que possibilitou a obtenção do resultado exposto na Tabela 4.2. Nota-se que, assim como na tabela anterior, os valores obtidos para as

frequências relativas se aproximavam das probabilidades de 33,3% e 66,7%, respectivamente, para o grão localizado na região azul e amarela.

Tabela 2 – Resultados obtidos pelos alunos para a frequência relativa de um grão na tira modelo B.

	Grão na região azul 	Grão na região amarela 
Localizações em 100 amostras (Resultados da equipe 1)	39	61
Frequência Relativa	$\frac{39}{100} = 39\%$	$\frac{61}{100} = 61\%$
Localizações em 200 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1 e 2)	77	123
Frequência Relativa	$\frac{77}{200} = 38,5\%$	$\frac{123}{200} = 61,5\%$
Localizações em 200 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1 e 2)	111	189
Frequência Relativa	$\frac{111}{300} = 37\%$	$\frac{189}{300} = 63\%$
Localizações em 200 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1 e 2)	140	260
Frequência Relativa	$\frac{140}{400} = 35\%$	$\frac{260}{400} = 65\%$

Fonte: O Autor, 2017

Aos estudantes também solicitou-se a realização de quatrocentos sorteios utilizando um grão agitado sobre a tira modelo C, cujos resultados estão expostos na Tabela 1.1 do APÊNDICE D.

4.3.4 Resultados do exercício operacional

No oitavo encontro foi aplicado um exercício avaliativo, disponível no APÊNDICE B, o qual versa sobre os temas abordados através dos organizadores prévios. As questões abordadas não apresentavam alto grau de complexidade, tratando-se de um exercício de

caráter operacional, que ficou estruturado assim: as quatro questões iniciais trataram, respectivamente, dos conceitos de superposição de estados, partícula quântica, redução de estados e indistinguibilidade. As seis questões seguintes envolveram a linguagem matemática utilizada, através dos conceitos de combinação linear, base e ortonormalidade, amplitude de probabilidade, operadores, autovalores e autovetores. O Quadro 4.2 resume os conceitos abordados em cada questão do exercício.

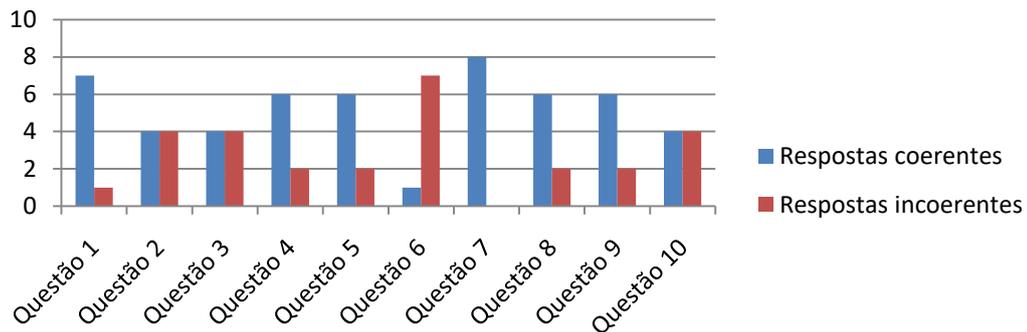
Quadro 2 – Relação dos temas tratados no exercício avaliativo sobre Mecânica Quântica.

<i>Questão</i>	<i>Tema abordado</i>
1	Superposição de estados
2	Partícula quântica
3	Redução de estados
4	Indistinguibilidade
5	Combinação linear
6	Base vetorial e ortonormalidade
7	Amplitude de probabilidade
8	Amplitude de probabilidade
9	Matriz de um operador
10	Autovalores e autovetores

Fonte: O Autor, 2017

Dentre as quatro questões iniciais, observou-se que os estudantes apresentaram resultados satisfatórios para os conceitos de superposição de estados e indistinguibilidade, enquanto as questões sobre partícula quântica e redução de estados o resultado foi regular. O Gráfico 4.10 apresenta o resultado, em colunas, para cada questão referente aos oito estudantes participantes.

Gráfico 5 – Resultado do exercício avaliativo sobre os temas de mecânica quântica.



Fonte: O Autor, 2017

Com relação à linguagem matemática, a maior dificuldade apresentada pelos estudantes foi referente ao conceito de base e ortonormalidade, onde apenas um estudante respondeu a questão da forma esperada, conforme a Figura 9. Isso demonstra que a ideia de base vetorial não foi bem desenvolvida para os estudantes.

Figura 9 – Imagem digitalizada da questão sobre base ortonormal respondida por um dos oito estudantes do grupo.

Escreva dois vetores da base vetorial de $|S\rangle$ que representem, respectivamente, $|A\rangle$ e $|B\rangle$.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Fonte: O Autor, 2017

A maioria dos estudantes conseguiu identificar como o vetor de estado pode ser escrito através de uma combinação linear e calcular a probabilidade a partir de uma amplitude de probabilidade conhecida, como na Figura 10. Uma das questões solicitava que o estudante identificasse qual das matrizes poderia representar um operador, o que os estudantes, em sua maioria, também conseguiram fazer.

Figura 10. Imagem digitalizada da questão sobre probabilidade resolvida por um dos estudantes.

Se $x = 0,4$, qual a probabilidade do sistema ser medido no estado $|B\rangle$?

- a) 16%
- b) 40%
- c) 60%
- d) 84%

$$\begin{aligned} 0,4^2 + y^2 &= 1^2 & y^2 &= 0,84 \\ 0,16 + y^2 &= 1 \\ y^2 &= 1 - 0,16 \end{aligned}$$

Fonte: O Autor, 2017

A questão que exigiu mais dos estudantes foi a décima, onde um operador Hamiltoniano de segunda ordem era dado e solicitava-se que fosse obtidos seus autovalores e autovetores. Metade dos estudantes conseguiu determinar os autovalores, porém nenhum conseguiu determinar os autovetores associados, conforme pode ser visto na resolução de um dos estudantes, na Figura 11. No entanto, observou-se que, do ponto de vista operacional, os estudantes conseguiam desenvolver o problema, o que demonstra uma matemática acessível a esse grau de estudo.

Figura 11 – Imagem digitalizada da resolução de um dos estudantes que conseguiu determinar os autovalores do Hamiltoniano do exercício. Nota-se, porém, o erro logo ao tentar escrever o primeiro autovetor.

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -x & 2 \\ 2 & -x \end{pmatrix}$$

$$\det = x^2 - 4 = 0$$

$$x^2 = 4$$

$$x = \sqrt{4}$$

$$x = \pm 2$$

$$\boxed{x = 2} \quad \rightarrow \quad \boxed{x = -2}$$

Autovalores

Quando: $x_1 = 2$ → Autovetor

$$\begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} -2a + 2b = 0 \Rightarrow 2b = 2a \\ 2a - 2b = 0 \end{cases} \quad b = a$$

$$\boxed{a = b}$$

Então, se o autovetor é

$$v_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \rightarrow v_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$v_1 = \begin{pmatrix} a \\ 2a \end{pmatrix} \rightarrow v_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Autovetor

normalizando =

$$\boxed{a^2 + b^2 = 1}$$

$$a^2 + (-2a)^2 = 1$$

$$a^2 + 4a^2 = 1$$

$$5a^2 = 1$$

$$a^2 = \frac{1}{5} \rightarrow \boxed{a = \frac{1}{\sqrt{5}}}$$

Pela condição de normalização =

$$\boxed{a^2 + b^2 = 1}$$

$$a^2 + (2a)^2 = 1$$

$$a^2 + 4a^2 = 1$$

$$5a^2 = 1$$

$$a^2 = \frac{1}{5}$$

$$\boxed{a = \sqrt{\frac{1}{5}}} \rightarrow \boxed{a = \frac{1}{\sqrt{5}}}$$

Quando $x_2 = -2$

$$\begin{pmatrix} -x & 2 \\ 2 & -x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} 4a + 2b = 0 \Rightarrow 2b = -4a \\ 2a + 4b = 0 \end{cases} \quad b = \frac{-4a}{2}$$

$$\boxed{b = -2a}$$

$$v_2 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \rightarrow v_2 = \begin{pmatrix} a \\ -2a \end{pmatrix}$$

$$v_2 = a \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \rightarrow \boxed{\frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}}$$

Autovetor

4.3.5 Pós-teste

Dois meses após o oitavo encontro do projeto, foi realizado um questionário pós-teste composto pelas questões 1, 2, 3, 4 e 6 do questionário pré-teste (APÊNDICE A), realizado no primeiro encontro com o grupo. Optou-se por essas questões por serem mais relevantes no que concerne à identificação da aprendizagem dos conceitos e ideias trabalhadas. O procedimento de averiguar antes e após uma série de medidas adotadas constitui o chamado *delineamento*⁵, o qual o mais utilizado é descrito em Moreira (2003, apud Campbell e Stanley, 1979, p. 14).

Neste delineamento, aplica-se um pré-teste 01 a um grupo, submete-se esse grupo a um tratamento X e aplica-se, então, um pós-teste 02. 01 e 02 significam que o mesmo grupo é observado antes e depois do tratamento que pode ser, por exemplo, um novo método de ensino ou um recurso didático alternativo. (p. 10)

No delineamento adotado para o projeto-piloto, o tratamento foi a sequência didática que envolveu os organizadores prévios, a utilização do material potencialmente significativo, a utilização de analogias e as avaliações formativas. A seguir, são discutidos os questionamentos feitos no pós-teste.

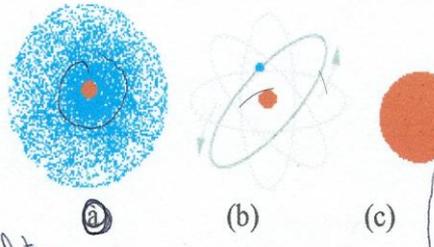
1ª Questão

Foram apresentadas três alternativas de modelos atômicos para que o estudante assinalasse aquela que melhor representaria o átomo de hidrogênio e que justificativa ele daria. No pré-teste, todos os estudantes assinalaram a letra (b), correspondente ao modelo semi-clássico de Bohr. No pós-teste, todos os estudantes mudaram e assinalaram a primeira alternativa, correspondente a um modelo com nuvem eletrônica. Quanto à justificativa, todos os estudantes fizeram menção à incerteza da localização do elétron, conforme exemplo da Figura 12. O resultado demonstra o efeito da intervenção da sequência didática, tendo em vista que 100% dos estudantes modificaram sua ideia de modelo atômico com órbitas bem definidas para um modelo com orbitais, conforme tratado nas analogias.

⁵ Delineamento de pesquisa é o plano e a estrutura da pesquisa.

Figura 12 – Imagem digitalizada da resposta de um dos estudantes à primeira questão do pós-teste.

1. Um átomo de hidrogênio é composto por um próton e um elétron. Qual das figuras a seguir você considera que melhor representa esse átomo? Justifique a sua resposta.



(a) (b) (c)

elétron =

2. O que você entende por orbital?

~~Orbital seria o local~~
~~possível de um elétron se~~
~~encontrar em região~~
 orbital é o local ^{em} possível

Na mecânica quântica (física moderna) trabalha muito com a probabilidade e não muito com a precisão. Logo, a melhor figura que representa essa definição é a "A". A maior probabilidade de se encontrar/de estar o elétron neste ~~local~~ ^{figura/átomo} é onde está a maior concentração de cor azul. Um elétron estará sempre em movimento na eletrosfera e em sua determinada camada, por isso, que não há como afirmar com precisão onde está o elétron.

Fonte: O Autor, 2017

2ª Questão

O estudante foi interrogado de forma objetiva sobre o que entendia por orbital. No pré-teste, as respostas foram mais vagas, onde a maioria afirmava que era o local onde se encontravam os elétrons, enquanto que no pós-teste as respostas foram melhor elaboradas, como observa-se na Figura 13, onde, inclusive, o termo “probabilidade” é citado no conceito do estudante.

Figura 13 – Imagem digitalizada da resposta de um dos estudantes à segunda questão do pós-teste.

2. O que você entende por orbital?

Os orbitais são regiões na eletrosfera do átomo em que a máxima a probabilidade de se encontrar o elétron.

Fonte: O Autor, 2017

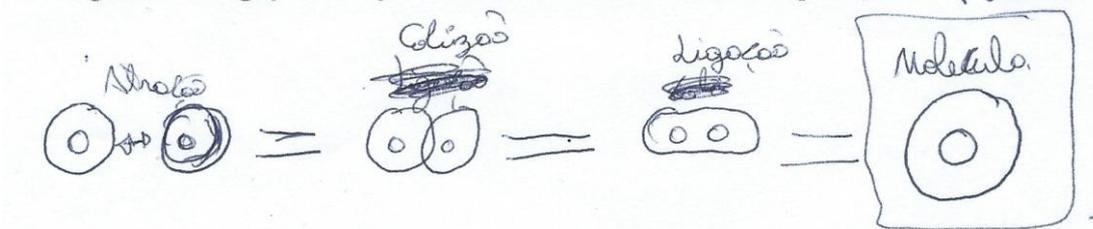
3ª Questão

O estudante era indagado sobre como ele idealiza uma ligação entre dois átomos, solicitando um desenho para ilustrar essa ideia. No pré-teste, grande parte dos estudantes se limitou a esboçar a fórmula estrutural da molécula de água como resposta, sem citar a ação dos orbitais e nem o compartilhamento de elétrons. No pós-teste alguns estudantes tornaram a

representar a ideia de ligação através da fórmula estrutural da água, no entanto foi possível observar a tentativa de alguns de usar a ideia de ligação através dos orbitais. Na Figura 14, um estudante respondeu através de desenhos expondo o átomo como um núcleo e uma região circular em volta, possivelmente o orbital. Nota-se que, em sua concepção, ao final do processo de ligação, a molécula apresenta apenas um núcleo (fusão), sugerindo que a molécula agora é uma nova entidade, mais complexa do que a simples junção de apenas dois átomos.

Figura 14 – Imagem digitalizada da resposta de um dos estudantes à segunda questão do pré-teste.

3. Uma molécula é formada pela ligação entre dois ou mais átomos. Como você imagina essas ligações? Faça um desenho ilustrando a sua explicação. **FUSÃO**

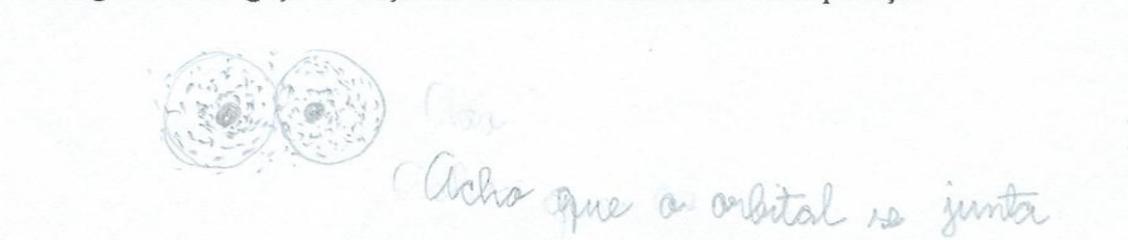


Fonte: O Autor, 2017

Ainda sobre o terceiro questionamento, uma estudante chegou a representar o que seria dois átomos ligados através de seus orbitais, Figura 15, resposta coerente com o que foi exposto nas aulas com *slides* sobre as ligações atômicas e as analogias.

Figura 15 – Imagem digitalizada da resposta de uma estudante à questão três do pós-teste.

3. Uma molécula é formada pela ligação entre dois ou mais átomos. Como você imagina essas ligações? Faça um desenho ilustrando a sua explicação.



O Autor, 2017

4ª Questão

Os estudantes foram indagados sobre o que conhecem sobre vetores, sua funcionalidade e como ele pode ser exemplificado. O objetivo do questionamento foi tentar identificar se o estudante associa o vetor à Mecânica Quântica após a sequência didática.

Assim como no pré-teste, os estudantes continuaram a associar vetores a módulo, direção e sentido e ao estudo da eletricidade, porém uma resposta merece destaque. Um dos estudantes mencionou que os vetores são capazes de descrever um sistema (Figura 16). Possivelmente o estudante se referiu ao vetor de estado ou aos vetores da base, discutidos na aula sobre Mecânica Quântica quando da descrição do sistema análogo. É importante ressaltar ainda que três estudantes mencionaram o fato do vetor poder ser representado por uma matriz, o que permite concluir que alguns passaram a agregar mais um significado a esse ente matemático após a sequência didática.

Figura 16 – Imagem digitalizada da resposta de um dos estudantes à quarta questão do pós-teste.

4. Você já ouviu falar em vetores? Se sim, para que serve um vetor? Cite exemplos onde o vetor pode ser empregado.

Sim, Os vetores servem para descrever um sistema.

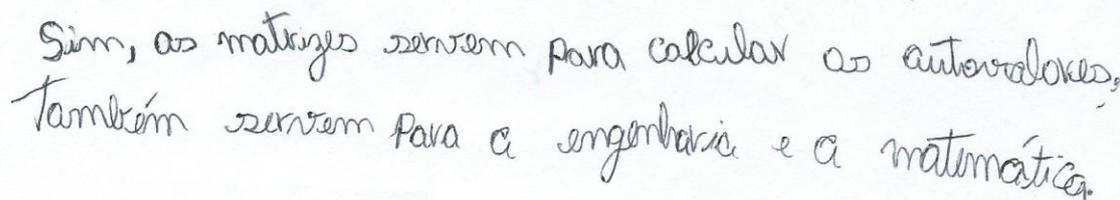
Fonte: O Autor, 2017

5ª Questão

O estudante foi interpelado sobre as matrizes e onde elas podem ser aplicadas. A intenção era identificar se o estudante conseguia dar significado às matrizes após as aulas de Mecânica Quântica, onde elas foram utilizadas como vetores e operadores. Todos os estudantes responderam a questão, mas apenas metade relacionou as matrizes com a Mecânica Quântica. Três estudantes afirmaram que as matrizes servem para calcular energia e um dos estudantes afirmou que as matrizes possibilitam o cálculo de autovalores, conforme a Figura 17. Tal fato sugere a ampliação de situações-problema a fim de ampliar o campo conceitual e, assim, evitar uma aprendizagem mecânica no que tange ao papel dos autovalores de uma matriz. Embora alguns tenham mencionado na questão anterior que o vetor pode ser representado por uma matriz, nesta quinta questão nenhum fez essa menção.

Figura 17 – Imagem digitalizada da resposta de um dos estudantes à quinta questão do pós-teste.

5. Você já ouviu falar em matrizes? Se sim, você poderia dizer para que servem as matrizes, ou seja, onde ela pode ser útil (aplicadas)?



Sim, as matrizes servem para calcular os autovalores,
Também servem para a engenharia e a matemática.

Fonte: O Autor, 2017

Analisando de forma geral, comparando o pós-teste e o pré-teste após a intervenção planejada, observou-se um avanço mais relevante no tocante ao novo conceito de modelo atômico, uma vez que todos os estudantes passaram a entender o modelo com orbitais moleculares como o mais coerente. Para os demais itens do questionário os resultados foram mais imprecisos, deixando dúvidas acerca da compreensão de alguns estudantes. Por fim, dado que o pós-teste foi realizado cerca de dois meses após a sequência didática e, dado que o conteúdo não é “cobrado” nas avaliações externas (ENEM), vê-se que o ensino com analogias – como estratégia para a formulação de organizadores prévios – para temas não-familiares teve um efeito substancial no processo de ancoragem de novos conceitos, permitindo considerar esse produto educacional como um primeiro protótipo que, para uma melhor eficácia, deve ser recursivamente melhorado.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho teve como foco desenvolver uma proposta didática para uma abordagem eficaz dos conteúdos de mecânica quântica no ensino médio. No início, identificou-se através de análises bibliográficas e enquete, duas necessidades evidentes para boa parte dos professores de Física do ensino médio: o devido aprimoramento para melhor capacitá-lo a tratar desse tema e materiais de apoio que possibilitem uma abordagem acessível ao estudante. Não é raro professores afirmarem que não dominam a mecânica quântica porque não lhes foi oportunizado estudá-la nas instituições acadêmicas. Na enquete, 40% dos professores se enquadram nesse perfil. Outros dados que chamam atenção é que mais de 90% dos professores pesquisados acham importante abordar a mecânica quântica em turmas do ensino médio, mas 73% não dispõem de um material específico para realizar essa abordagem. Ainda que o professor desejasse ensinar tópicos de mecânica quântica no ensino médio, ele não teria como buscar apoio nos atuais livros didáticos e teria que recorrer a outras fontes para compor seu próprio material de trabalho.

Um projeto-piloto foi criado a fim de realizar testes juntamente com oito estudantes do terceiro ano do ensino médio para ajudar no desenvolvimento de um material didático sobre mecânica quântica para dar suporte ao professor. Através desse projeto, foi possível observar sucessos e falhas acerca desse material e sua aplicação. Um dos obstáculos já esperado foi o fato dos estudantes não possuírem os conceitos básicos necessários à implantação da proposta didática e, mesmo com a utilização de recursos plurissensoriais, como o projetor de *slides* e o *kit* experimental, a consolidação de alguns desses conceitos permaneceu aquém do esperado, o que não inviabiliza a proposta como um todo, mas sugere um re-ordenamento de estratégias. Foram apresentadas lacunas com relação a conceitos básicos de atomística e regras básicas de matrizes. Com relação aos cálculos exigidos nos exercícios, boa parte dos estudantes conseguiu demonstrar a resolução dos problemas propostos, mas presume-se que o resultado poderia ter sido melhor se o tempo dedicado ao reforço da linguagem matemática das matrizes, fundamentais à ancoragem de alguns conceitos de mecânica quântica, fosse maior, o que deve ser revisto em estratégias futuras.

Quanto à aplicação do *kit* “Onde Está o Grão?”, os estudantes mostraram-se bastante receptivos e colaboradores, criando um ambiente salutar, interativo e propício à prática da atividade. Constatou-se uma forte tendência dos estudantes tomarem o *kit* como um jogo de adivinhações. A princípio, isso não é ruim, pois ajuda ao promover um ambiente mais relaxado, sociável e favorável a indagações, mas pode comprometer o objetivo final da

aprendizagem dos conteúdos se houver excessos. Com relação à sua função como modelo análogo, o *kit* demonstrou ser um excelente instrumento, capaz de possibilitar a criação de diversas analogias, embora para compreendê-las alguns organizadores prévios devam ser intensamente trabalhados.

Embora o projeto-piloto tenha sido encerrado, esta proposta didática ainda não encontra-se finalizada. Atualmente, novos procedimentos estão sendo planejados para uma etapa futura, com o desenvolvimento de novas configurações para o modelo análogo, a inserção da matemática computacional como ferramenta facilitadora na obtenção de resultados e de aplicações tecnológicas. Conforme já mencionado, a escassez desse conteúdo nos livros didáticos de física do ensino médio mediante um quadro de desenvolvimento tecnológico crescente ao qual os estudantes estão submetidos, necessita ser suplantada, o que exige iniciativas capazes de romper paradigmas e criar novas soluções. O trabalho desenvolvido até aqui constitui apenas um pequeno passo na tentativa de promover uma discussão mais apurada sobre a mecânica quântica em sala de aula e espera-se que através dele novas propostas possam surgir nesse sentido.

REFERÊNCIAS

ALCÁCER, L. *Introdução à química quântica computacional*. Lisboa: IST Press, 2007.

ALMEIDA, H. A.; LORENCINI JÚNIOR, A.. *O Modelo TWA e os níveis de organização das analogias: Implicações para a prática docente*. Revista da SBEnBio. Número 9, 2016.

ÁVILA, E. A. *Mecânica Quântica para o ensino médio: explorando a utilização de recursos didáticos diversos*. Maringá, 2016.

BALSAS, A. *Realismo e localidade em mecânica quântica*. Campina Grande: EDUEPB, 2013.

BOLDRINI, J. L. et al. *Álgebra Linear*. 3ª Edição. São Paulo: Harper & Row do Brasil, 1980.

BONJORNO, J. R.. *Física: eletromagnetismo, física moderna*. 3º ano. 3 ed. São Paulo: FTD, 2016.

BRASIL. Ministério da Educação. Secretaria da Educação Média e Tecnológica. *Parâmetros Curriculares Nacionais + (PCN+) - Ciências da Natureza e suas Tecnologias*. Brasília: MEC, 2002.

BRASIL. Secretaria de Educação Fundamental. *Referencial Curricular Nacional para a Educação Infantil*. v.1. Brasília: MEC/SEF, 1998.

BROUSSEAU, G. *Fundamentos e Métodos da Didática da Matemática*. In: BRUN, J. Didática das Matemáticas. Tradução de: Maria José Figueiredo. Lisboa: Instituto Piaget, 1996.

CARVALHO, A. M. P. *Calor e Temperatura: um ensino por investigação*. 1ª ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2014.

CHESMAN, C.; ANDRÉ, C.; MACÊDO, A. *Física moderna experimental e aplicada*. 1ª ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2004.

DUIT, R. *On the role of analogies and metaphors in learning science*. Science Education. Volume 75. Issue 6. 1991.

EISBERG, R. M., RESNICK, R., *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos e Partículas*. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.

GLYNN, S. M. *Teaching science with analogies: a resource for teachers and textbooks authors*. Washington: National Reading Research Center, 1994.

GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. Tradução: Lara Freitas. Revisão técnica: Marcelo Mulato. 2ª Edição. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

KISHIMOTO, T.M.; *O Brincar e suas Teorias*. Organização: Tizuco Morchida Kishimoto. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 1998.

MIRANDA, E. T. *Uma proposta para lecionar Física Quântica no ensino médio por meio de unidades de ensino potencialmente significativas*. Silvana Perez, 2016.

MOREIRA, M. A. *Aprendizagem Significativa: a teoria e textos complementares*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2011.

MOREIRA, M.A., *Pesquisa em ensino: aspectos metodológicos*. Programa Internacional de Doctorado en Enseñanza de las Ciencias. Texto de apoyo nº 19. Burgos: 2003.

MOREIRA, M.A. *Subsídios teóricos para o professor pesquisador em ensino de ciências: A Teoria da aprendizagem significativa*. Porto Alegre: 1ªed. 2009. Disponível em: <https://www.if.ufrgs.br/~moreira/Subsidios6.pdf>. Acesso em 14 de setembro de 2017.

NARDI, R. org. *Ensino de ciências e matemática, I: temas sobre a formação de professores* [online]. São Paulo: Editora UNESP; São Paulo: Cultura Acadêmica, 2009.

OSTERMANN, F; MOREIRA, M. A. *Atualização do currículo de física na escola de nível médio: um estudo dessa problemática na perspectiva de uma experiência em sala de aula e da formação inicial dos professores*. Revista Catarinense de Ensino de Física. v. 18, n. 2: p. 135-151, ago. 2001.

PAIVA, R. A. S. *A importância do uso de cartuns como ferramentas auxiliares no ensino de conceitos de Mecânica Quântica no Ensino Médio*. Brasília, 2015.

PENROSE, R. et al. *O grande, o pequeno e a mente humana*. Organização: Malcolm Longair. Tradução: Roberto Leal Ferreira. São Paulo: Fundação Editora da UNESP, 1998.

PEREZ, N. *Mecânica Quântica: Um curso para professores da educação básica*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016.

PINTO, A. C.; ZANETIC, J. *É possível levar a física quântica para o ensino médio?* Revista Catarinense de Ensino de Física, v. 16, n. 1: p. 7-34, abr. 1999.

PRATES JÚNIOR, M. S. L.; SIMÕES NETO, J. E. *Situações-problema como estratégia didática para o ensino com modelos atômicos*. Revista Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia. vol 8, num. 2, mai-ago 2015.

REDAÇÃO. *78% dos Jovens Usam Smartphone, Mostra Pesquisa*. Revista Exame. 14 de outubro de 2014. Tecnologia. <<https://exame.abril.com.br/tecnologia/78-dos-jovens-usam-smartphone-mostra-pesquisa/>> Acesso em: agosto de 2017

SALDANHA, P. *Quase 50% dos professores não tem formação na matéria que ensinam*. Folha de São Paulo. 23 de janeiro de 2017. Educação. <<http://www1.folha.uol.com.br/educacao/2017/01/1852259-quase-50-dos-professores-nao-tem-formacao-na-materia-que-ensinam.shtml>> Acesso em: junho de 2017.

TORRES, C. M. A. et al. *Física: ciência e tecnologia*. Volume 3. 4ª Ed. São Paulo: 2016.

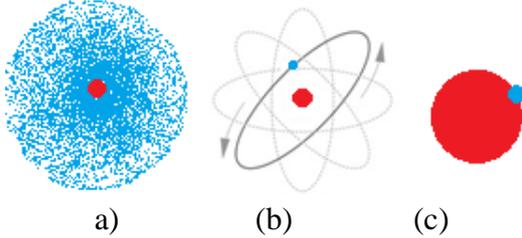
VALADARES, E. C.; CHAVES, A. S.; ALVES, E. G. *Aplicações da Física quântica: do transistor à nanotecnologia*. 1ª ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.

YAMAMOTO, K.; FUKU, L. F.. *Física para o ensino médio. Vol. 3: eletricidade, física moderna*. 4ª ed. São Paulo: Saraiva, 2016.

WEBBER, M. C. M, RICCI, T. R., *Inserção de mecânica quântica no ensino médio : uma proposta para professores*. Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Ensino de Física. Porto Alegre, 2007.

APÊNDICE A – Pré-teste

1. Um átomo de hidrogênio é composto por um próton e um elétron. Qual das figuras a seguir você considera que melhor representa esse átomo? Justifique a sua resposta.



2. O que você entende por orbital?
3. Uma molécula é formada pela ligação entre dois ou mais átomos. Como você imagina essas ligações? Faça um desenho ilustrando a sua explicação.
4. Você já ouviu falar em vetores? Se sim, para que serve um vetor? Cite exemplos onde o vetor pode ser empregado.
5. Dentro de um globo, desses de loteria, há três bolinhas idênticas, a não ser pelas cores: azul, amarela e vermelha.
- a) Ao se fazer apenas 1 sorteio, qual a probabilidade de cada bolinha ser sorteada? (Dê sua resposta em fração.)
- b) Suponha que o mesmo sorteio foi repetido 10 vezes, obtendo-se o seguinte resultado: bolinha azul sorteada 2 vezes, bolinha amarela sorteada 3 vezes e bolinha vermelha sorteada 5 vezes. Este resultado confirma ou contraria sua resposta anterior? Tente explicar.
6. Você já ouviu falar em matrizes? Se sim, você poderia dizer para que servem as matrizes, ou seja, onde ela pode ser útil (aplicadas)?
7. Dados: $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 5 & -3 \end{pmatrix}$ e $B = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$, determine:
- a) $A + B$

b) $A \cdot B$

c) A^t

8. Você já ouviu falar em Mecânica Quântica? Onde? O que você sabe a respeito?

APÊNDICE B – Exercício de verificação operacional

Informações para as questões 1 a 3.

Suponha que um elétron em átomos ligados de uma molécula seja representado macroscopicamente por um grão agitado dentro de uma caixinha sobre uma tira de papel com duas regiões iguais demarcadas.

1. Durante a agitação da caixinha, o sistema encontra-se:
 - a) Em uma combinação de estados.
 - b) Em um estado bem definido.
 - c) Em um semiestado.
 - d) Em dois estados bem definidos.

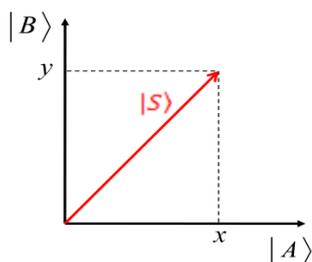
2. O elétron é uma partícula quântica, pois:
 - a) Possui um estado físico bem definido.
 - b) Apresenta característica corpuscular e ondulatória.
 - c) Comporta-se similarmente a um grão numa caixa.
 - d) Sua trajetória é irregular.

3. Caso um aparelho conseguisse detectar a posição exata do elétron em determinado instante, é certo dizer que no momento dessa medição:
 - a) O elétron seria detectado como onda.
 - b) O elétron seria detectado em mais de uma posição.
 - c) O elétron estaria numa superposição de estados.
 - d) O sistema teria sofrido uma redução de estado.

4. Dois elétrons num mesmo sistema quântico são localizados em dois instantes diferentes. É correto afirmar que:
 - a) É impossível distingui-los.
 - b) Eles são distinguidos através de suas trajetórias.
 - c) Eles são distinguidos pelas suas velocidades.
 - d) Eles são distinguidos pelas suas cargas.

Informações para as questões 5 a 8.

A figura seguinte descreve um sistema quântico em que o vetor $|S\rangle$ representa o estado do sistema antes de uma medição. Os vetores $|A\rangle$ e $|B\rangle$ são os dois estados possíveis para a posição de uma partícula.



5. O vetor $|S\rangle$ pode ser escrito como:
- $|S\rangle = x^2 |A\rangle + y^2 |B\rangle$
 - $|S\rangle = \langle x|A\rangle + \langle y|B\rangle$
 - $|S\rangle = x |A\rangle + y |B\rangle$
 - $|S\rangle = x^2|A\rangle - y^2|B\rangle$
6. Escreva dois vetores da base vetorial de $|S\rangle$ que representem, respectivamente, $|A\rangle$ e $|B\rangle$.
7. O que x representa?
- A probabilidade do sistema se encontrar no estado $|A\rangle$.
 - A amplitude de probabilidade do sistema se encontrar no estado $|A\rangle$.
 - A projeção do estado $|B\rangle$ no estado $|A\rangle$.
 - A projeção do estado $|S\rangle$ sobre o estado $|B\rangle$.
8. Se $x = 0,4$, qual a probabilidade do sistema ser medido no estado $|B\rangle$?
- 16%
 - 40%
 - 60%
 - 84%
9. Em Mecânica Quântica, observáveis podem ser compreendidos como operadores representados por matrizes que possibilitam a obtenção de determinados valores. Por exemplo, são observáveis: posição, momento linear e energia. Justifique se as matrizes abaixo podem, ou não, representar operadores.

a) $\begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$

b) $\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

c) $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & -5 \end{pmatrix}$

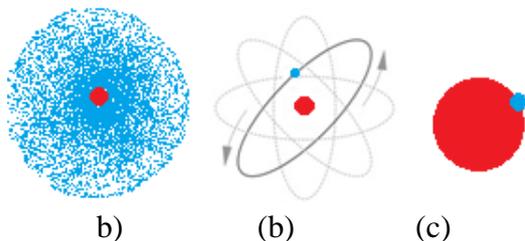
10. Admita que um sistema macroscópico composto por 1 grão agitado sobre uma tira modelo A, tem sua energia total descrita pelo operador Hamiltoniano

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Calcule os autovalores de energia e seus autovetores correspondentes.

APÊNDICE C – Pós-teste

1. Um átomo de hidrogênio é composto por um próton e um elétron. Qual das figuras a seguir você considera que melhor representa esse átomo? Justifique a sua resposta.



2. O que você entende por orbital?
3. Uma molécula é formada pela ligação entre dois ou mais átomos. Como você imagina essas ligações? Faça um desenho ilustrando a sua explicação.
4. Você já ouviu falar em vetores? Se sim, para que serve um vetor? Cite exemplos onde o vetor pode ser empregado.
5. Dentro de um globo, desses de loteria, há três bolinhas idênticas, a não ser pelas cores: azul, amarela e vermelha.
- a. Ao se fazer apenas 1 sorteio, qual a probabilidade de cada bolinha ser sorteada? (Dê sua resposta em fração.)
- b. Suponha que o mesmo sorteio foi repetido 10 vezes, obtendo-se o seguinte resultado: bolinha azul sorteada 2 vezes, bolinha amarela sorteada 3 vezes e bolinha vermelha sorteada 5 vezes. Este resultado confirma ou contraria sua resposta anterior? Tente explicar.

Você já ouviu falar em matrizes? Se sim, você poderia dizer para que servem as matrizes, ou seja, onde ela pode ser útil (aplicadas)?

APÊNDICE D – Conteúdo da apostila “Onde Está o Grão?”

APRESENTAÇÃO

Esta apostila é parte de uma proposta didática destinada a professores de física do ensino médio que buscam de forma alternativa, aplicar em sala de aula atividades com materiais de baixo custo e de fácil aquisição. Em virtude do número significativo de tecnologias, as quais os estudantes lidam no cotidiano ser fruto de aplicações de conceitos e princípios da mecânica quântica, buscou-se contribuir para que este campo da física seja estabelecido como parte dos parâmetros curriculares de física para o ensino médio. Reconhecendo que seu estudo amplo e aprofundado exige pré-requisitos bem compreendidos na física e na matemática do ensino superior, alguns conceitos podem ser explorados de forma lúdica e matematicamente acessível, através de operações com matrizes ensinadas ao longo do ensino básico de matemática.

Como ponto de partida onde vários conceitos de mecânica quântica pudessem emergir naturalmente, criou-se um modelo macroscópico análogo ao modelo quântico de elétrons em átomos ligados de uma molécula, capaz de permitir ao estudante compreender os conceitos abordados através de analogias e de forma significativa. Esse modelo macroscópico é constituído de um *kit* de testes probabilísticos intitulado “Onde Está o Grão?”, o qual teve sua eficácia averiguada em um projeto-piloto com participação de oito estudantes da terceira série do ensino médio que, de forma voluntária e dedicada, submeteram-se a sucessivas experimentações, possibilitando averiguar êxitos, dificuldades e falhas que conduziram aos devidos aperfeiçoamentos e à elaboração desta apostila. Espera-se, com esta proposta didática, que o professor sinta-se capacitado a difundir o estudo da mecânica quântica em sala de aula, promovendo a compreensão acerca de novas tecnologias e estimulando o surgimento de novas ideias que possam contribuir para a assimilação deste conteúdo.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1	
Modelo análogo macroscópico “Onde Está o Grão?”	61
1.1 Confeção da versão física do modelo análogo	61
1.2 Manuseio da versão física do modelo análogo	65
1.3 Confeção da versão digital do modelo análogo	68
CAPÍTULO 2	
Prelúdio matemático	73
CAPÍTULO 3	
Algumas analogias	76
CAPÍTULO 4	
Síntese da evolução da mecânica quântica	82
4.1 Princípio da complementaridade	83
4.2 Estado quântico	84
4.3 Princípio da superposição	85
4.4 Redução de estados	87
4.5 Princípio da indistinguibilidade	88
4.6 Ortonormalidade	89
4.7 Autovalores e autovetores	89
4.8 Operador Hamiltoniano (optativo)	95
SUGESTÕES AO PROFESSOR	111
REFERÊNCIAS	112

Capítulo 1

Modelo análogo macroscópico

“Onde Está o Grão?”

Um dos pilares da teoria da aprendizagem significativa de David Ausubel é a necessidade de um material potencialmente significativo que auxilie o aprendiz na compreensão dos conceitos a serem abordados. O *kit* de testes probabilísticos “Onde Está o Grão?” foi desenvolvido para exercer esse papel, possibilitando ainda:

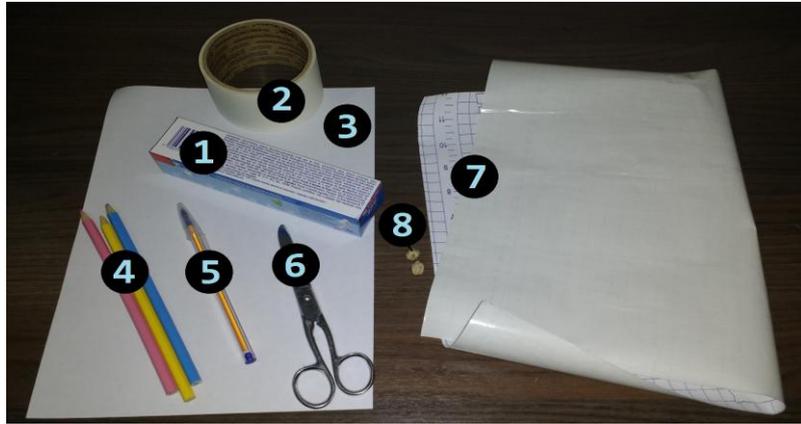
- a) Estimular a participação dos estudantes através de uma atividade lúdica e promovendo o ensino por investigação.
- b) Servir como modelo macroscópico análogo ao modelo quântico de elétrons em átomos ligados de uma molécula.
- c) Possibilitar a obtenção de dados empíricos para o cálculo de probabilidades a partir de frequências relativas.

O *kit* é o modelo análogo macroscópico do modelo quântico de elétrons em átomos ligados e, de modo que possa ser acessível a professores e estudantes, foi idealizado com materiais de baixo custo e de fácil aquisição. Neste capítulo serão apresentadas duas versões possíveis desse *kit*: física e digital, ambas testadas em um projeto-piloto com um grupo de oito estudantes concluintes do ensino médio.

1.1 Confeção da versão física do modelo análogo

Esta seção destina-se à descrição dos materiais necessários à confeção do *kit*, bem como sua montagem e manuseio. Propõe-se que os próprios estudantes o confeccionem sob orientação do professor. Nos testes realizados com o *kit*, quatro duplas de estudantes receberam todos os itens necessários à montagem. Verificou-se que o tempo de confeção do *kit* por parte de cada dupla variou entre 13 e 16 minutos. A Figura 1.1 ilustra todos os materiais necessários à versão física do *kit*.

Figura 1.1: Materiais utilizados na confecção da versão física do *kit* “Onde Está o Grão?”. 1 – Caixa de embalagem de creme dental. 2 – Fita crepe. 3 – Folha de papel ofício A4. 4 – Lápis de colorir em três diferentes cores. 5 – Caneta esferográfica. 6 – Tesoura. 7 – Papel *contact* transparente. 8 – Grãos de bico.



Fonte: O Autor, 2017

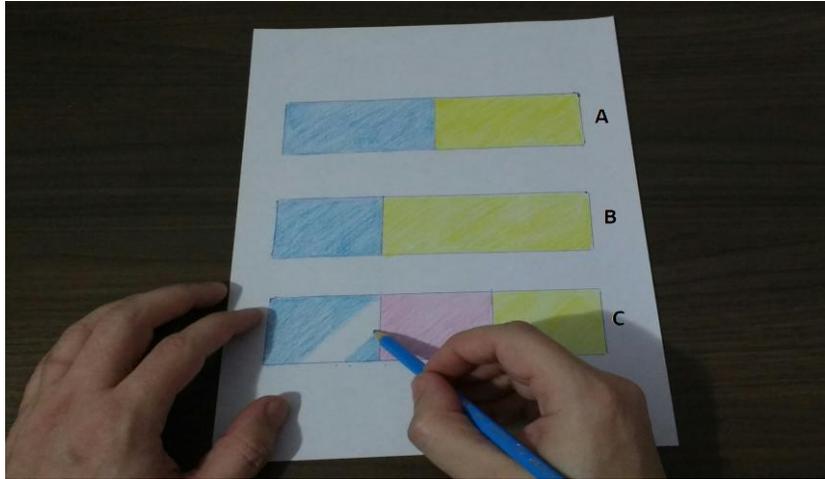
O *kit* deve ser manuseado sobre a superfície lisa de uma mesa, na qual deve ser disposto um campo de testes contendo três tiras de papel de modelos diferentes. O tamanho das tiras é esboçado no papel ofício A4 com auxílio da caixa de creme dental e, posteriormente, colorido e recortado. Por fim, uma camada de papel *contact* transparente é aplicada sobre as três tiras. As Figuras 1.2 a 1.4 descrevem os procedimentos de confecção desse campo de testes.

Figura 1.2: Foto do procedimento para confecção dos três modelos de tira de papel. Com a caneta, contorna-se a embalagem de creme dental, desenhando-se no papel ofício três retângulos de mesmo comprimento e altura.



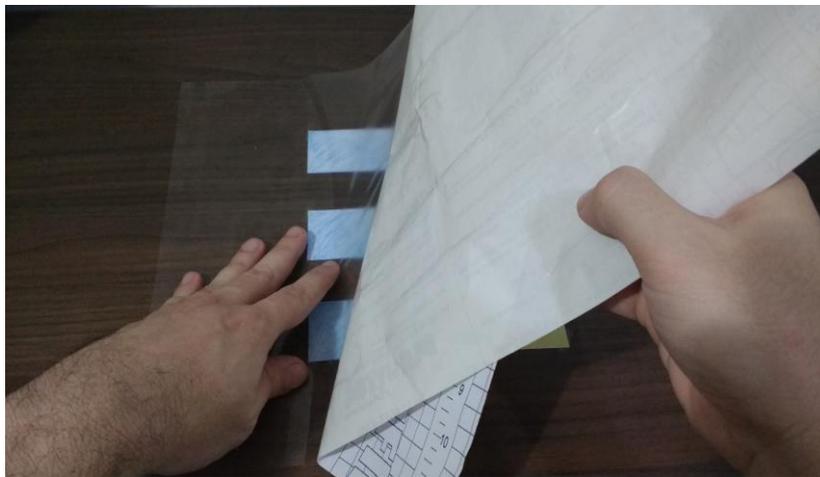
Fonte: O Autor, 2017

Figura 1.3: Foto da pintura dos três modelos de tiras de papel. Modelo *A* – Duas áreas de mesmo tamanho nas cores azul e amarelo. Modelo *B* – Duas áreas na proporção de 1:2, respectivamente, nas cores azul e amarelo. Modelo *C* – Três áreas de mesmo tamanho nas cores azul, rosa e amarelo.



Fonte: O Autor, 2017

Figura 1.4: Foto da aplicação do adesivo. Recorta-se o papel *contact* transparente nas dimensões de 30 cm x 40 cm e em seguida aplica-se sobre os três modelos de tiras dispostos como na imagem. Recomenda-se cuidado neste procedimento para que não haja formação de bolhas em demasia que possam a vir a comprometer o manuseio do *kit*.



Fonte: O Autor, 2017

Estando pronto o campo de testes, deve-se, então, preparar a caixinha, a qual deve cobrir e agitar os grãos-de-bico. Utilizando-se a tesoura, recorta-se da caixinha uma de suas faces com mesmas dimensões que as tiras (Figura 1.5).

Figura 1.5: Foto do recorte de uma das faces da caixinha.



Fonte: O Autor, 2017

Após ter uma de suas faces recortada, a caixinha passa a ter sua estrutura inconsistente, problema este que pode ser solucionado com a aplicação de fita crepe nas faces menores (Figura 1.6), de forma a fixar e dar mais resistência às dobras.

Figura 1.6: Foto da aplicação de fita crepe adesiva em uma das faces menores da caixinha. O uso da fita adesiva compensa a perda da face recortada da caixinha, auxiliando a dar sustentação e reforçando a estrutura.



Fonte: O Autor, 2017

Após os procedimentos descritos e ilustrados nas Figuras 1.2 a 1.6, o *kit* encontra-se pronto para manuseio, constando do campo de testes, a caixinha e os grãos (Figura 1.7).

Figura 1.7: Foto da *kit* “Onde Está o Grão” confeccionado, contendo: o campo de testes com os modelos de tira *A, B* e *C*, sob o papel *contact*, a caixinha e os grãos-de-bico.



Fonte: O Autor, 2017

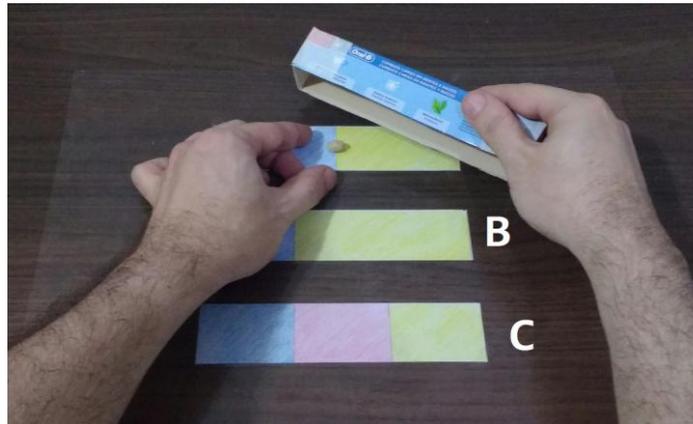
1.2 Manuseio da versão física do modelo análogo

Conforme mencionado no início deste capítulo, um dos objetivos do *kit* é proporcionar a composição de um banco de dados empíricos para, através do cálculo de frequências relativas, obterem-se probabilidades acerca da localização do grão nas diversas regiões coloridas das tiras de papel. Cada teste realizado é um sorteio para averiguar-se a localização do grão sobre as tiras. Espera-se que, com a execução de uma quantidade extremamente grande de testes realizados sob as mesmas condições, a frequência relativa de localização do grão, em cada área da tira, seja um valor aproximadamente igual à probabilidade. Segundo Meyer (1983), essa característica da frequência relativa é denominada **regularidade estatística**.

Para utilizar adequadamente o *kit* para obtenção de dados, deve-se escolher um modelo de tira (*A*, *B* ou *C*) e o número de grãos a serem sorteados. Para os primeiros trabalhos, recomenda-se que o espaço amostral não exceda o total de três vetores da base, a fim de que a matemática empregada esteja acessível ao estudante e não seja um obstáculo à compreensão da teoria. Nesse caso, utilizam-se as tiras modelos *A* e *B* com um ou dois grãos e a tira *C* apenas com um.

Após a definição da tira e da quantidade de grãos, executam-se os sorteios. Na Figura 1.8, por exemplo, observa-se a preparação para o sorteio de um grão sobre a tira modelo *A*. O grão deve ser colocado no centro da tira e em seguida coberto pela caixinha.

Figura 1.8: Foto da preparação do sorteio do grão sobre a tira modelo A..



Fonte: O Autor, 2017

Após o grão ser coberto pela caixinha, a mesma deve ser posicionada exatamente sobre a tira e, posteriormente, movimentada rapidamente em diversas direções (Figura 1.9), promovendo a agitação do grão.

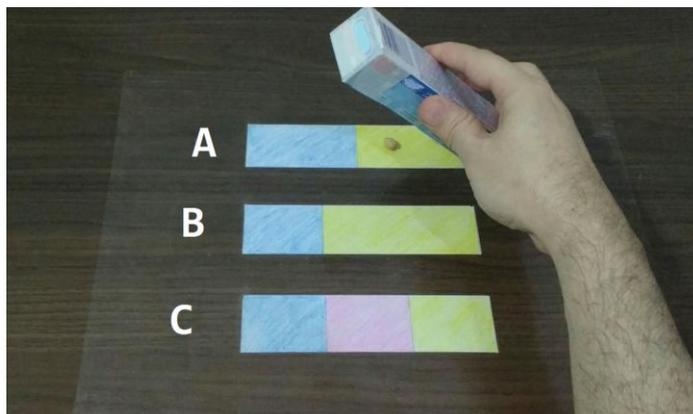
Figura 1.9: Foto da caixinha sobre a tira modelo A. O grão se encontra coberto pela caixinha, que deve ser agitada aleatoriamente em diversas direções, conforme indicação das setas vermelhas.



Fonte: O Autor, 2017

Depois de agitada por alguns segundos, a caixinha deve ser posta em repouso sobre a tira na mesma posição do início da agitação. Em seguida, deve ser erguida (Figura 1.10) para observar-se a localização (esquerda ou direita) do grão sobre a tira. Esse procedimento deve ser repetido o máximo de vezes possível para a criação de um banco de dados.

Figura 1.10: Foto do momento da observação da localização do grão (lado direito da tira A) após a agitação da caixinha.



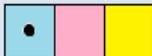
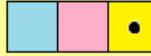
Fonte: O Autor, 2017

Caso o grão encontre-se sobre a fronteira entre duas regiões de cores distintas, deve-se observar sobre qual das regiões o grão predomina. Não havendo tal predominância, sugere-se agitar o grão novamente.

Os estudantes, ao contabilizarem o total de vezes que o grão se localiza em cada região da tira, devem fazer esse registro em uma tabela na qual deve constar a frequência relativa para cada localização. A frequência relativa de um evento é obtida pela razão entre o número de ocorrências desse evento e o total de amostras. Por exemplo, supondo que em 50 lançamentos (amostras) de uma moeda, sob as mesmas condições, a face “cara” tenha sido sorteada 20 vezes, a frequência relativa desse evento é, portanto, $20/50 = 40\%$.

A Tabela 1.1 apresenta o resultado obtido com a agitação de um grão sobre a tira modelo C, por quatro equipes de estudantes. Cada equipe obteve resultado para 100 amostras. As linhas 2 e 3 da tabela apresentam os resultados obtidos pela equipe 1. Os resultados das linhas seguintes (4 e 5; 6 e 7; 8 e 9) foram obtidos somando-se os resultados anteriores aos de uma nova equipe, conforme descreve a primeira coluna. Esse procedimento possibilita que os estudantes projetem a ideia de que, contabilizando-se um número de amostras cada vez maior, a frequência relativa tende a estabilizar-se em um resultado cada vez mais próximo da probabilidade, nesse caso, 33,3%, conforme esperado pela regularidade estatística.

Tabela 1.1: Resultados das frequências relativas obtidas com 1 grão na tira modelo C.

	Grão na região azul 	Grão na região rósea 	Grão na região amarela 
Localizações em 100 amostras (Resultados da equipe 1)	26	43	31
Frequência Relativa	$\frac{26}{100} = 26\%$	$\frac{43}{100} = 43\%$	$\frac{31}{100} = 31\%$
Localizações em 200 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1 e 2)	55	80	65
Frequência Relativa	$\frac{55}{200} = 27,5\%$	$\frac{80}{200} = 40\%$	$\frac{75}{200} = 32,5\%$
Localizações em 300 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1, 2 e 3)	88	109	103
Frequência Relativa	$\frac{88}{300} = 29,3\%$	$\frac{109}{300} = 36,3\%$	$\frac{103}{300} = 34,3\%$
Localizações em 400 amostras (Somatório dos resultados das equipes 1,2,3 e 4)	128	142	130
Frequência Relativa	$\frac{128}{400} = 32\%$	$\frac{142}{400} = 35,5\%$	$\frac{130}{400} = 32,5\%$

Fonte: O Autor, 2017

1.3 Confeção da versão digital do modelo análogo

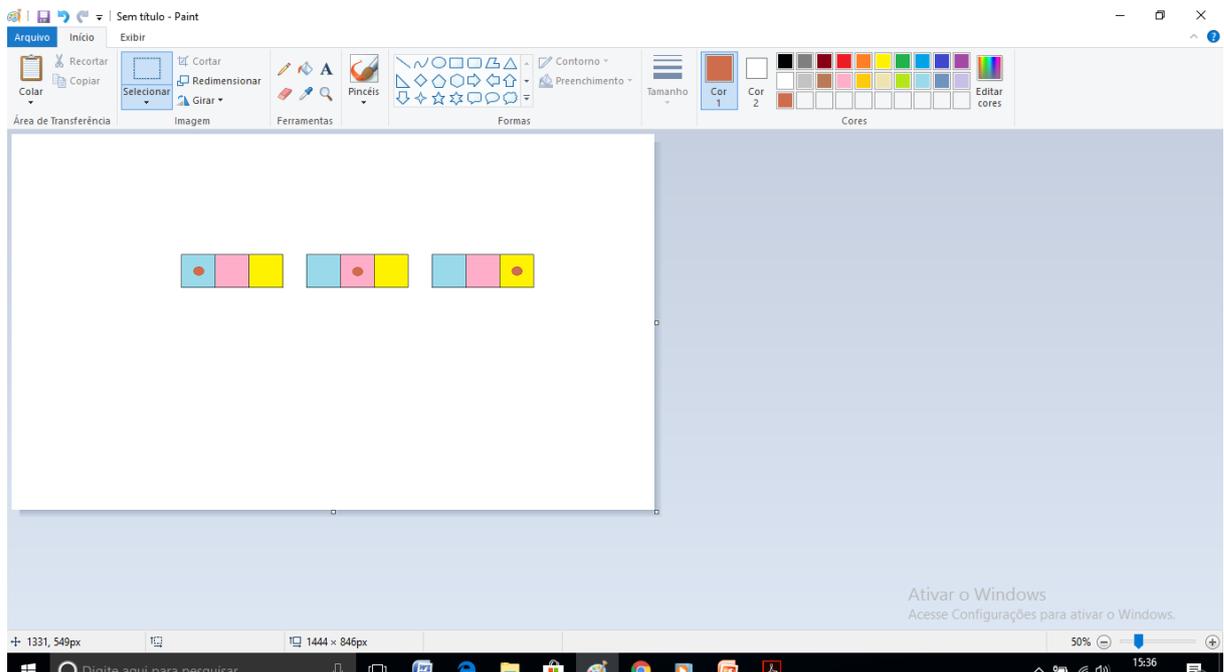
A segunda versão do *kit* “Onde Está o Grão?”, modelo análogo macroscópico de elétrons em átomos ligados em moléculas, foi desenvolvida para uso em *smartphones* considerando que, mesmo esses aparelhos não sendo de baixo custo, atualmente são bastante difundidos entre os estudantes. Em pesquisa divulgada em Exame (2014), 78% dos jovens brasileiros declararam já possuir um *smartphone*. Nesta seção serão descritos os procedimentos para a confeção do *kit* realizados através de um computador com sistema operacional *Windows* e um *smartphone* de plataforma *Android*, porém outras plataformas também disponibilizam aplicativos com a mesma funcionalidade.

A versão digital do *kit* consiste em utilizar um aplicativo leitor de arquivos *gif* para executar os sorteios do grão através do toque na tela do *smartphone*. O processo de confecção se dá em três etapas:



Para elaborar os desenhos que representam o espaço amostral, utilizou-se a ferramenta para desenhos *Paint*, disponível no *Windows 10*. A Figura 1.11 apresenta os desenhos do espaço amostral do sistema macroscópico composto por 1 grão numa tira modelo *C*. Observe-se que, como as regiões da tira possuem áreas iguais, a probabilidade de localização do grão em cada região é a mesma, logo, deve ser feita a mesma quantidade de desenhos para cada localização do grão.

Figura 1.11: Imagem da elaboração dos desenhos, no *Paint*, para posterior criação do arquivo *gif*. Neste caso, um grão na tira modelo *C*.

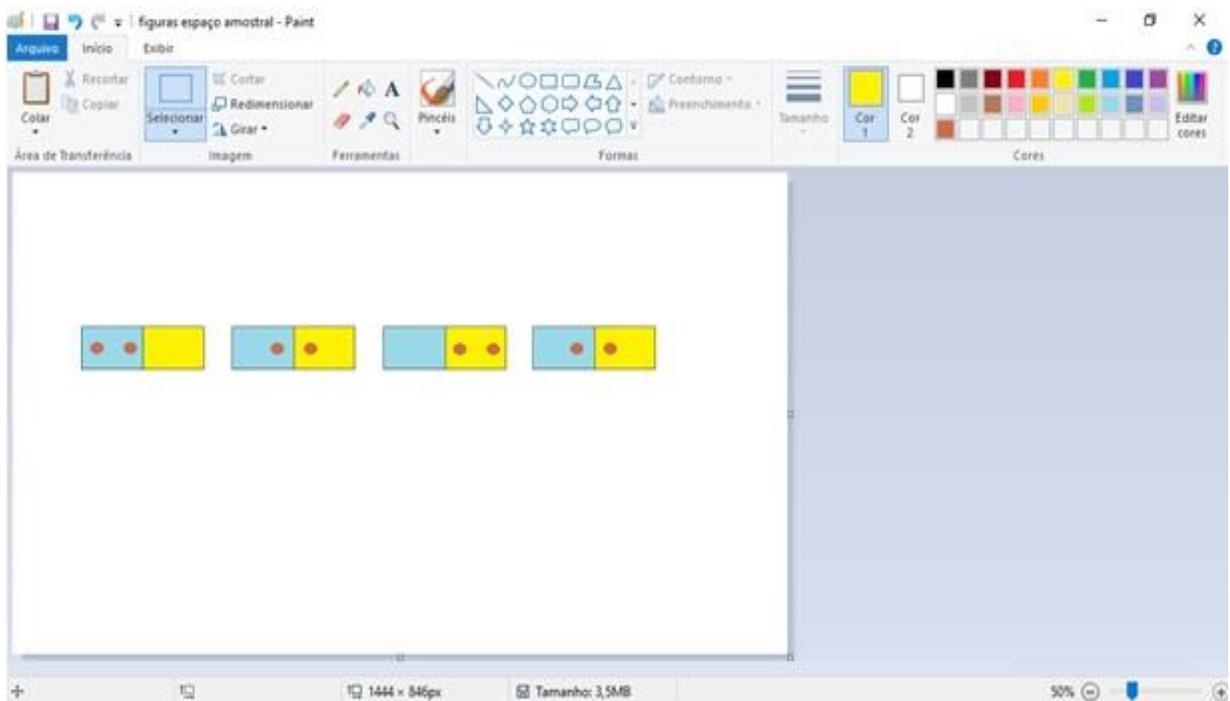


Fonte: O Autor, 2017

Em alguns casos a probabilidade de localização do grão em cada região colorida não é sempre a mesma, logo, o número de desenhos constituintes do espaço amostral deve ser proporcional à probabilidade da amostra que eles representam. Por exemplo, a Figura 1.12 apresenta os desenhos do espaço amostral para o caso de 2 grãos em uma tira modelo *A*.

Conforme discussão que será feita no Capítulo 3, não é possível distinguir um grão do outro após cada sorteio, conseqüentemente, a probabilidade de serem sorteados em regiões distintas é de $1/2$, enquanto a probabilidade de ambos serem localizados em uma mesma região é de $1/4$. Logo, metade dos desenhos deve apresentar os grãos em regiões distintas, simbolizando a mesma amostra. Cada desenho componente do espaço amostral deve ser gravado individualmente em formato *jpeg*.

Figura 1.12: Elaboração, no *Paint*, dos desenhos do espaço amostral de 2 grãos na tira modelo A, constando dois desenhos idênticos dos grãos em regiões distintas.



Fonte: O Autor, 2017

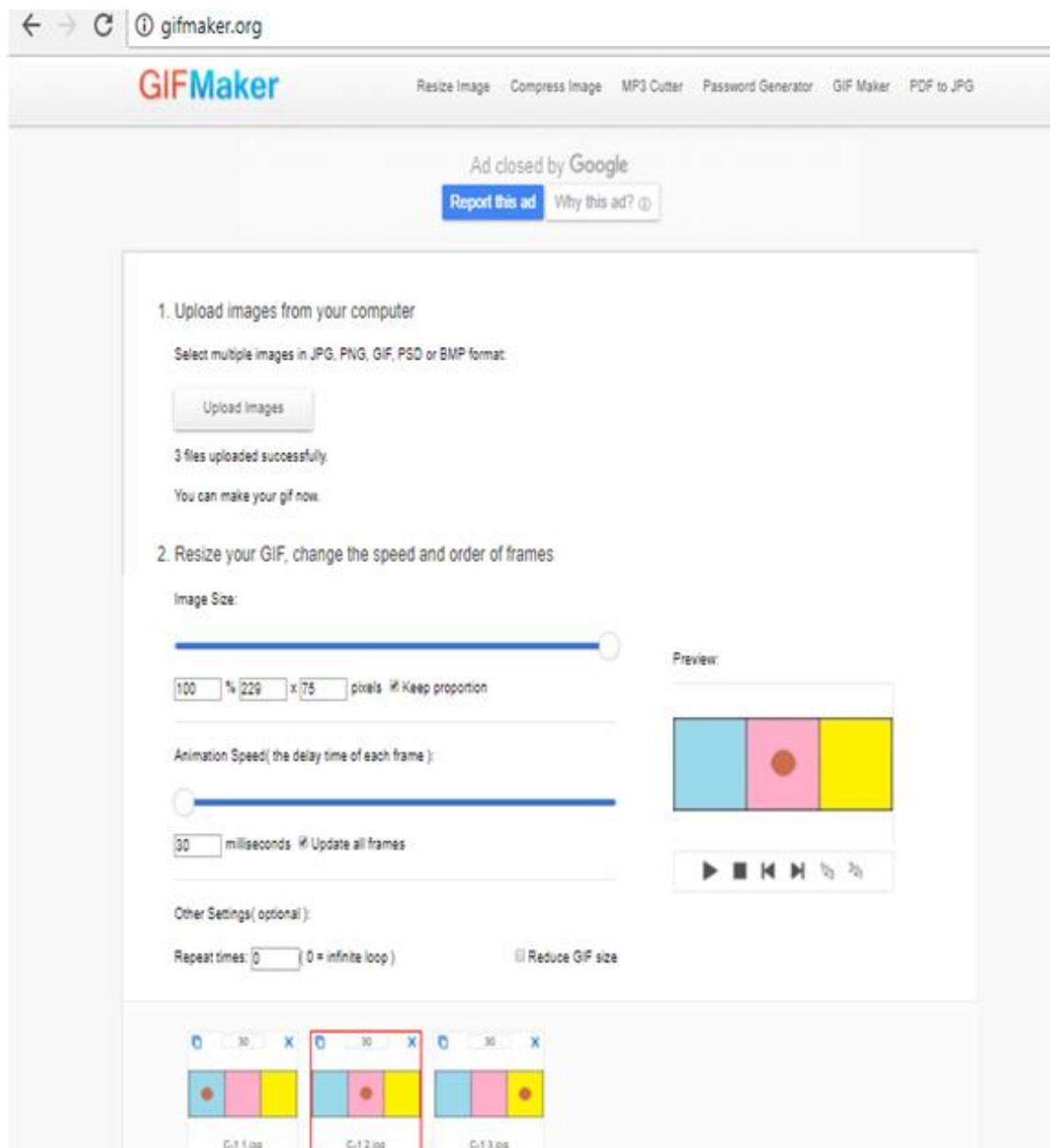
Para criar um *gif* animado a partir dos desenhos do espaço amostral é necessário recorrer a algum *site* criador desse tipo de arquivo. Existem vários que oferecem esse recurso gratuitamente. Como sugestões, citam-se: *gifmaker.org* e *gifmaker.me*. A Figura 1.13 apresenta a imagem da criação do *gif* através da página *gifmaker.org*, com os três desenhos da Figura 1.11. O processo de criação ocorre em três procedimentos:

1º) Realiza-se o *upload* dos arquivos *jpeg* de cada desenho que compõe o espaço amostral.

2º) Define-se o tempo de atraso entre a exibição de cada desenho (em *animation speed*). Recomenda-se entre 30 ms e 40 ms, para que visualmente perceba-se a presença do grão, quase que simultaneamente, em cada compartimento colorido.

- 3º) Para uma exibição contínua (*infinite loop*), em *repeat times* insere-se 0 (zero).
- 4º) Finaliza-se o processo clicando em *create animation*. Logo ao final da página há a opção para *download*.

Figura 1.13: Imagem da página virtual *gifmaker.org*, onde os gifs animados foram elaborados.



Fonte: O Autor, 2017

Após a criação do *gif* animado, transfere-se o mesmo para o *smartphone*, que em alguns modelos, necessitará de um aplicativo leitor de *gif* para fazer a leitura do arquivo.

Nos testes realizados com os estudantes, utilizou-se o *GIFAnimPlay*, aplicativo gratuito e disponível para plataforma *Android*. Definido o arquivo a ser executado, um toque na região central da tela do aparelho inicia a simulação do movimentando do grão sobre as regiões coloridas. Um segundo toque pausa a imagem em um dos desenhos definindo em qual região o grão foi localizado. Similar ao ato de erguer a caixinha na versão física do modelo análogo.

Capítulo 2

Prelúdio Matemático

No meio acadêmico a mecânica quântica é abordada através da mecânica ondulatória de Schrödinger e da mecânica matricial de Heisenberg. Devido às limitações da matemática vista no ensino médio, apenas a mecânica matricial será abordada nesta apostila. Espera-se que estudantes em fase de conclusão do ensino médio dominem as operações matriciais tratadas nesta proposta didática, porém recomenda-se que o professor certifique-se da existência desse domínio e que, em caso contrário, reforce esse conteúdo. Este capítulo não tem como objetivo reforçar o estudo das matrizes, mas sim apresentar os conceitos e operações necessárias à discussão quantitativa dos tópicos de mecânica quântica abordados no próximo capítulo. A seguir, apresenta-se um breve resumo fundamentado em Boldrini et al. (1980) acerca dos conceitos e operações que serão utilizados posteriormente.

Matriz linha

Matriz que apresenta apenas uma linha.

Exemplo: $L = (-1 \quad 2)$

Matriz coluna

Matriz que apresenta apenas uma coluna.

Exemplo: $C = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$

Matriz quadrada

Matriz que possui a mesma quantidade de linhas e colunas.

Exemplo: $Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$

Matriz diagonal

Matriz quadrada em que apenas os elementos da diagonal principal são não-nulos.

Exemplo: $D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix}$

Matriz identidade

Matriz diagonal em que todos os elementos da diagonal principal são iguais a 1.

Exemplo: $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Matriz transposta

É a matriz M^t obtida a partir da inversão de linhas por colunas de uma matriz M .

Exemplo: Se $M = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}$, então, $M^t = (-2 \quad 1)$.

Matriz simétrica

É a matriz quadrada S igual a sua transposta S^t .

Exemplo: $S = \begin{pmatrix} -3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$.

Multiplicação de um escalar por matriz

Se k é um escalar e M uma matriz de elementos m_{ij} , para i linhas e j colunas, fazendo kM obtém-se uma matriz de elementos km_{ij} .

Exemplo: Se $k = 6$ e $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$, então, $kM = \begin{pmatrix} 0 & 6 \\ 12 & -6 \end{pmatrix}$.

Soma de matrizes

Dois matrizes só podem ser somadas se o número de linhas e colunas da primeira for, respectivamente, igual aos da segunda. Atendida essa condição, somam-se os elementos de mesma posição.

Exemplo: Se $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}$ e $N = \begin{pmatrix} 2 & -5 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, então, $M + N = \begin{pmatrix} 2 & -4 \\ 4 & -2 \end{pmatrix}$.

Multiplicação entre matrizes

Dois matrizes só podem ser multiplicadas se o número de colunas da primeira for igual ao número de linhas da segunda. Atendida essa condição, cada elemento da matriz-produto, p_{ij} (da i -ésima linha e j -ésima coluna), é obtido multiplicando-se os elementos da i -ésima linha da primeira matriz pelos elementos correspondentes da j -ésima coluna da segunda matriz, e somando-se esses produtos. Dentre as propriedades desta operação, ressalta-se que, em geral, a comutatividade não é válida.

Exemplo: Se $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}$ e $N = \begin{pmatrix} 2 & -5 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, então,

$$M \cdot N = \begin{pmatrix} 0 \cdot 2 + 1 \cdot 1 & 0 \cdot (-5) + 1 \cdot 0 \\ 3 \cdot 2 - 2 \cdot 1 & 3 \cdot (-5) - 2 \cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 4 & -15 \end{pmatrix}$$

$$\text{e } N \cdot M = \begin{pmatrix} 2 \cdot 0 - 5 \cdot 3 & 2 \cdot 1 - 5 \cdot (-2) \\ 1 \cdot 0 + 0 \cdot 3 & 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -15 & 12 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Combinação linear

Uma combinação linear é qualquer relação do tipo $ax + by + cz + \dots$, onde a, b e c são constantes.

Exemplo: A matriz $M = \begin{pmatrix} 4 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$ pode ser escrita como a seguinte combinação linear:

$$\begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} = 4 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

em que os vetores $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ formam a **base** do espaço vetorial de M .

Capítulo 3

Algumas analogias

Para uma devida compreensão das analogias apresentadas neste capítulo, é importante ressaltar que a mecânica quântica obtém grande êxito ao explicar a estrutura e os espectros das moléculas, mesmo tratando-se de modelos nanoscópicos profundamente complexos. Uma questão crucial nesse estudo é o porquê dos átomos se combinarem formando diversas moléculas. Como justificativa, Tipler e Llewellyn (2014, p. 235) afirma que “(...) é importante reconhecer que todos os tipos de ligações moleculares se devem ao fato de que a energia total da molécula é menor do que a soma das energias dos átomos que a compõem, quando considerados separadamente (...)”. Ainda, segundo Tipler e Llewellyn (2014), quando dois átomos interagem ao formar uma molécula, seus orbitais se combinam através de mecanismos associados às atrações e repulsões eletrostáticas, às propriedades ondulatórias dos elétrons e ao princípio de exclusão, dando origem ao *orbital molecular*. Esta é uma das maneiras de compreender esse sistema quântico, mas a mecânica quântica não possui apenas uma linha interpretativa. Pessoa Júnior (2003), por exemplo, expõe quatro interpretações para os fenômenos da mecânica quântica: *ondulatória*, *corpúscular*, *realista dualista* e *da complementaridade*, sendo esta última oriunda da *Escola de Copenhague* e mais aceita entre os físicos.

Um dos objetivos da utilização do *kit* é possibilitar a compreensão de modelos nanoscópicos através de analogias, nesse caso, analogias entre o modelo macroscópico de grãos na caixinha e o modelo quântico de elétrons em átomos ligados (modelo alvo). Neste capítulo são relacionadas algumas dessas analogias, porém, cabe ressaltar que elas não têm, necessariamente, que serem discutidas todas em um só momento. É importante que o professor planeje a inserção de cada analogia, que pode ocorrer à medida que temas de mecânica quântica forem abordados. Segundo Shawn Glynn (1994), pesquisador e criador do método *TWA (Teaching With Analogies)*, um dos procedimentos para um eficaz ensino com analogias é a identificação dos limites de validação do modelo análogo adotado. Após a série de testes ao qual o modelo macroscópico foi submetido como análogo, alguns limites foram identificados em relação ao modelo alvo. Esses limites estão descritos logo após cada

analogia, que por sua vez, não se esgotam nesta relação, podendo ser ampliadas pelo professor.

1ª Analogia:

Durante a agitação da caixinha não há certeza acerca da posição e do momento linear do grão, simultaneamente, assim como, a priori, não há certeza da posição e do momento linear, simultaneamente, do elétron.

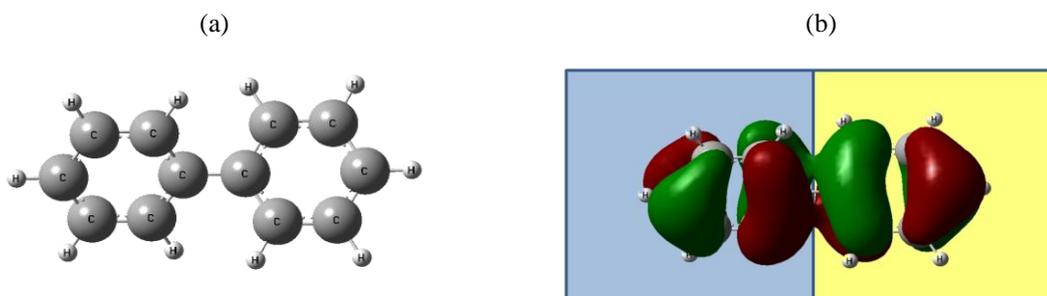
Limite da 1ª analogia:

Não existe uma relação de incerteza para o modelo análogo, de modo que ao erguer a caixinha sabe-se onde o grão está e que está parado.

2ª Analogia:

Os grãos movimentam-se dentro da caixinha submetidos a um potencial gravitacional uniforme, sendo compartilhados por todas as regiões demarcadas, assim como elétrons movimentam-se submetidos a um potencial Coulombiano, sendo compartilhados por átomos ligados em uma molécula. A Figura 3.1a corresponde ao esquema de uma molécula de bifenil. A Figura 3.1b mostra a sobreposição de um orbital ocupado dessa molécula⁶ na tira modelo A. As cores verdes e vermelhas em regiões do orbital devem-se ao que os matemáticos chamam de oposição de fase. Observa-se que cada região colorida da tira de papel está associada a um grupo fenil da molécula. Um grão agitado sobre essa tira apresenta a mesma probabilidade de encontrar-se do lado azul ou do lado amarelo.

Figura 3.1. (a) Esquema de uma molécula de bifenil. (b) Molécula de bifenil com orbital molecular ocupado, com um anel benzeno sobre cada região retangular colorida, demonstrando a associação entre o modelo análogo macroscópico de grão na caixinha e o modelo quântico de elétrons em átomos de uma mesma molécula. Nota-se que a probabilidade de um elétron ser localizado em qualquer um dos anéis benzeno é a mesma.



Fonte: O Autor, 2017

⁶ Todas as figuras de orbitais apresentadas neste capítulo foram elaboradas com auxílio do *software Gauss View 3.07*.

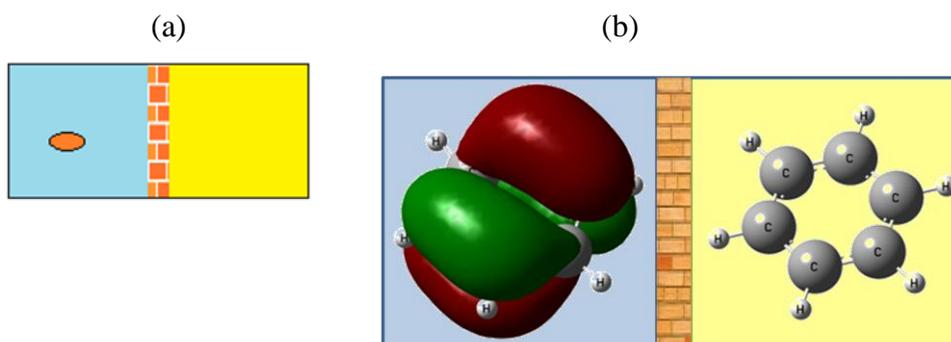
Limite da 2ª analogia:

O compartilhamento do grão dentro da caixinha está limitado entre direita e esquerda, enquanto numa molécula o compartilhamento do elétron é muito mais complexo, pois envolve muitos átomos e diversas interações (elétron-elétron), que não são levadas em conta no modelo análogo.

3ª Analogia:

Se houvesse barreiras entre as regiões demarcadas da tira de papel, o grão não seria compartilhado, ou seja, agitando a caixinha nessas condições, ele seria encontrado sempre numa mesma região colorida, assim como átomos de moléculas diferentes e isoladas não compartilham elétrons. Esta analogia pode ser compreendida por uma experiência mental, já que o *kit* não foi desenvolvido com separação entre as regiões coloridas. A Figura 3.2a ilustra esta analogia apresentando o desenho da tira com as regiões separadas por uma barreira (de tijolos). A Figura 3.2b representa esta analogia através de duas moléculas de benzeno que não compartilham elétrons, isoladas, respectivamente, nas regiões azul e amarela, sendo a da esquerda com o orbital ocupado.

Figura 3.2. (a) Desenho de uma tira modelo A com uma barreira entre as regiões azul e amarela, impedindo o compartilhamento do grão. (b) Esquema de duas moléculas de benzeno isoladas, sendo a primeira, na região azul, com orbital ocupado. E a segunda, com orbital vazio, na região amarela.



Fonte: O Autor, 2017

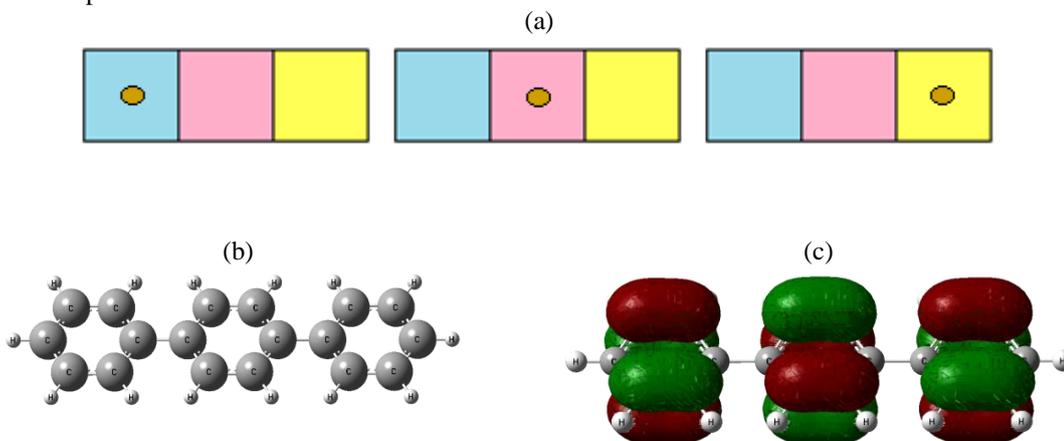
Limite da 3ª analogia:

A “barreira” entre duas moléculas isoladas não é “física”, no sentido de existir um meio material que impeça o compartilhamento de elétrons, como ocorre no modelo análogo.

4ª Analogia:

A localização do grão em cada cor da tira corresponde a um vetor da base do sistema análogo. Um possível estado desse sistema corresponde à combinação linear desses vetores. De modo análogo, a localização espacial de um elétron numa molécula corresponde a um estado quântico formado pela combinação linear de vetores de uma base. Se o grão for agitado pela caixinha sobre uma tira de papel modelo C, por exemplo, há três possibilidades de localização, como mostra a Figura 3.3a, similarmente a um elétron compartilhado pelos átomos de carbono ligados em uma molécula de terfenil, na Figura 3.3b, indicando três estados possíveis para o sistema. Na Figura 3.3c, a molécula de terfenil é esquematizada com um orbital molecular ocupado, apresentando a mesma probabilidade para a localização do elétron em qualquer grupo fenil. Nota-se que o grupo central possui um átomo de hidrogênio a menos, contudo, como ele é muito menor que um carbono, é possível considerar essa aproximação.

Figura 2.3. (a) Desenhos das três possíveis localizações de um grão na tira modelo C. (b) Esquema de uma molécula de terfenil. (c) Esquema de um orbital da molécula de terfenil ocupado.



Fonte: O Autor, 2017

Limite da 4ª analogia:

Os vetores da base do sistema quântico podem ser expressos matematicamente em termos de funções como senos, cossenos, polinômios, exponenciais ou produto entre essas. Isso não ocorre com os vetores da base do modelo análogo. A construção da base tem um caráter, relativamente, arbitrário, por exemplo, é possível escolher uma base ortonormal ou não. Outro limite é que só faz sentido a interpretação probabilística, no modelo análogo, dentro de uma visão corpuscular, a qual Pessoa Júnior (2003) denomina de *Interpretação dos Coletivos Estatísticos*. Portanto, não faz sentido a realização de apenas um ou mesmo poucos sorteios.

5ª Analogia:

A posição do grão só é conhecida quando a caixinha é erguida para que se possa observá-lo. Esta ação define uma medição realizada, assim como a posição de um elétron em uma molécula só é conhecida realizando-se uma medição. No momento da realização da medição ocorre a redução de estados, pois o sistema passa de uma combinação para um único estado. Vale salientar que, em mecânica quântica, há várias interpretações para o fenômeno da redução de estado: ondulatória, corpuscular, dualista realista e da complementaridade.

Limite da 5ª analogia:

O processo de medição no modelo análogo é direto, ou seja, ergue-se a caixinha e observa-se o grão com os próprios olhos, diferentemente de um sistema quântico, onde o processo de medição ocorre de maneira indireta. Conforme afirma Bunge (1974), “[...] os ‘observáveis’ das teorias quânticas não representam traços diretamente observáveis. [...] tais medidas requerem não apenas complexos acessórios de laboratório, mas também teorias adicionais (macrofísicas) para projetar as peças dos aparatos e interpretar suas leituras.”

6ª Analogia:

As paredes da caixinha impedem que os grãos escapem de seu interior, assim como, em um modelo teórico onde uma molécula isolada é tratada como um poço de potencial infinito, os elétrons nesse poço se encontrarão confinados dentro de uma região bem definida.

Limite da 6ª analogia:

Assim como no limite da 3ª analogia, o potencial de confinamento do elétron na molécula não é “físico”, no sentido de existir um meio material que impeça sua fuga, como ocorre no modelo análogo através das paredes da caixinha.

7ª Analogia:

A probabilidade de encontrar o grão dentro da caixinha como um todo (considerando a soma de todas as regiões possíveis) após a agitação é 1 (ou 100%) e 0 fora da caixinha, assim como também é 1 a probabilidade de se encontrar o elétron em toda a região do espaço. Tratando a molécula como um poço de potencial infinito, a probabilidade será 1 dentro do poço e zero fora dele.

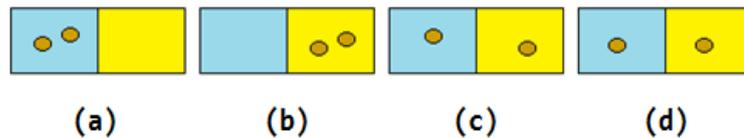
Limite da 7ª analogia:

No caso do modelo análogo “discretiza-se” a região espacial em poucos compartimentos (regiões coloridas), enquanto no sistema quântico a região espacial é contínua, apesar de também ser possível “discretizá-la” de maneira, relativamente, arbitrária.

8ª Analogia:

Em caso de se trabalhar com dois grãos dentro da caixinha, sendo eles tão semelhantes, torna-se extremamente difícil diferenciá-los nesse mesmo sistema, assim como dois elétrons em um mesmo sistema quântico são indistinguíveis. Tomando como exemplo o sistema com dois grãos bastante semelhantes agitados sobre uma tira modelo A, há quatro distribuições possíveis, conforme apresenta a Figura 3.4. Sendo os grãos tão semelhantes, nota-se que nas situações (c) e (d) qualquer medida deverá apresentar as mesmas chances de ocorrência.

Figura 3.4. Esquema da distribuição de dois grãos sobre a tira de modelo A.



Fonte: O Autor, 2017

Limite da 8ª analogia:

Não há garantias de que o elétron tenha um formato perceptível, ao contrário do grão. Outras características estão relacionadas apenas ao elétron e não ao grão, como: *spin*, momento angular, estatística de férmions, entre outras.

CAPÍTULO 4

Síntese da evolução da mecânica quântica

Para compreender a importância da mecânica quântica é importante ressaltar que ao final do século XIX, os princípios da mecânica clássica já não conseguiam explicar de maneira satisfatória alguns fenômenos observados experimentalmente que envolviam os menores constituintes da matéria e a radiação, como, por exemplo, a emissão discreta de comprimentos de onda de luz emitida por átomos de um gás sob alta temperatura (KNIGHT, 2009). Porém, em 1900, Max Planck anunciou ter encontrado uma função empírica capaz de satisfazer os resultados experimentais relacionados à radiação do corpo negro, propondo a ideia de que a energia irradiada não seria contínua, mas sim discretizada⁷. Segundo a teoria de Planck – a teoria quântica – a energia radiada deveria ser quantizada, mais especificamente um múltiplo de um fator h , denominado *constante de Planck*. Com base nessa teoria, vários cientistas embasaram suas justificativas para diversos fenômenos de caráter microscópico, como, por exemplo, o efeito fotoelétrico, explicado por Albert Einstein em 1905 (TIPLER e LLEWELLYN, 2014). Outra grande contribuição da teoria quântica foi no tocante ao desenvolvimento de novos modelos atômicos. Em 1913, Niels Bohr lançou mão de quatro postulados, combinando a teoria quântica de Planck, o conceito de fóton de Einstein, o modelo atômico de Ernest Rutherford e a mecânica newtoniana para enunciar seu modelo atômico semiclássico, em que um elétron deveria emitir radiação ao transitar de um estado estacionário de maior energia para um de menor energia. Nesse caso, Bohr propunha que o fóton emitido deveria ter energia dada por um múltiplo de h (KNIGHT, 2009). Outro fato marcante na história da teoria quântica foi a proposição de Louis de Broglie em sua tese de doutorado em 1923, de que assim como os fótons, a matéria também assume caráter dual, apresentando propriedades de onda e de partícula. Essa argumentação foi tratada no primeiro momento como mera especulação pela comunidade científica, no entanto, no mesmo ano foi corroborada pelo experimento desenvolvido por C. J. Davisson e L. H. Germer. Esse experimento consistia numa variação do experimento de dupla fenda de Thomas Young, que ao incidir um feixe de luz sobre duas fendas de uma mesma placa, gerava um padrão de

⁷ No sentido matemático de apresentar-se em quantidades distintas.

interferência. No caso de Davisson e Germer, esse padrão de interferência foi obtido a partir do espalhamento de elétrons com baixa energia (JEWETT JR. e SERWAY, 2012).

A teoria quântica desenvolvida duas décadas e meia após os postulados de Planck constitui a chamada “antiga teoria quântica”. Embora bem sucedida quando aplicada a diversas situações em que a mecânica clássica já não atendia, essa fase da teoria quântica deixava a desejar em algumas situações como, por exemplo, nos tratamentos de sistemas não-periódicos e de átomos com mais de um elétron na camada de valência. Porém, após muitos esforços, Erwin Schrödinger desenvolveu em 1925 sua teoria da mecânica quântica, generalizando os postulados de Louis de Broglie e marcando uma nova etapa na teoria quântica. (EISBERG e RESNICK, 1979). Em paralelo aos esforços de Schrödinger, Werner Heisenberg apresentou sua mecânica matricial, que de outra forma corroborava os resultados de Schrödinger. Em 1927, Heisenberg tratou de outro aspecto fundamental da teoria quântica, as incertezas experimentais nas medições. Ao estabelecer o princípio da incerteza, ele demonstrou que é fisicamente impossível medir simultânea e exatamente a posição e o momento linear de uma partícula, reforçando os aspectos indeterminista e probabilístico da teoria (TIPLER e LLEWELLYN, 2014).

A mecânica quântica probabilística tornou-se um dos pilares da física contemporânea. Seus aspectos históricos e filosóficos não são alvo de discussão desta proposta didática, ficando a critério do professor fazê-la caso julgue necessário. As seções deste capítulo abrangem os conceitos básicos necessários à aplicação do *kit* de testes probabilísticos “*Onde Está o Grão?*” como ferramenta didática. A seguir discutem-se alguns tópicos de mecânica quântica necessários à compreensão desta proposta didática.

4.1 Princípio da complementaridade

Esse princípio foi proposto em 1927 por Bohr em uma conferência na cidade italiana de Como. Segundo ele:

*Para a matéria, os modelos de onda e
de partícula se complementam.*

Em outras palavras, Bohr propõe que os modelos de onda e de partícula, tanto para a matéria quanto para a radiação, se complementam, mas não ocorrem simultaneamente em um mesmo experimento. Conforme esclarece Mahon (2011), se um ente físico exhibe seu caráter ondulatório em determinado experimento, torna-se impossível que ele apresente qualquer

caráter corpuscular. De outro modo, se apresentará como partícula caso seja representado por um pacote de onda bastante compacto, sendo assim, perde a capacidade de manifestar-se como onda.

Na Mecânica Clássica é comum atribuir-se a concepção de partícula ideal a um ente físico que tem por características: dimensões desprezíveis e localização no espaço, o que permite que sua trajetória seja bem definida. De acordo com Knight (2009), na Mecânica Quântica, considerando-se o princípio da complementaridade, tais características não são satisfatórias, visto que o ente físico reúne aspecto corpuscular e ondulatório e, portanto, não possui localização no espaço bem definida. Para suprir a condição de que esta dualidade seja contemplada, adota-se o modelo de *partícula quântica* para o ente físico que têm características de partícula e de onda e, com base no fenômeno em estudo, defini-se qual das características é a mais adequada para sua compreensão.

4.2 Estado quântico

A Mecânica Quântica tem como peculiaridade, diversos conceitos abstratos os quais só adquirem algum significado físico mediante algumas operações matemáticas. Um desses conceitos é de estado quântico. Segundo Pessoa Júnior (2003), a interpretação da Escola de Copenhague, formada por Bohr e seus seguidores, compreendia que o estado quântico é a descrição mais “completa” de um ente quântico. Mais especificamente, um instrumento matemático capaz de possibilitar cálculos e obter previsões, concepção esta denominada *instrumentalismo*. Na notação de Dirac, o estado quântico é representado por um *vetor de estado*, $|\psi\rangle$, correspondente à *função de onda*, ψ , da mecânica de Schrödinger. Conforme explica Alcácer (2007), é comum representar a função de onda e o estado quântico através do mesmo símbolo, ψ , mas ambos se distinguem por pertencerem a espaços diferentes. Dirac chamou de *ket* o vetor de estado representado por $|\psi\rangle$, que é comumente chamado de *estado*. A empregabilidade do vetor de estado é mais abrangente, pois há situações em que não é possível descrever o estado de um sistema por uma função de onda, como, por exemplo, no caso do spin de partículas quânticas. A respeito da notação de Dirac, Pessoa Júnior comenta:

Esta notação curiosa para estados quânticos foi introduzida por Dirac em 1926. Um vetor de estado $|\psi_A\rangle$ é apelidado de “ket”, enquanto que seu dual $\langle\psi_B|$ é o “bra”, de forma que juntos formam um “bracket” (um tipo de parêntese): $\langle\psi_B|\psi_A\rangle$, que representa o produto escalar dos vetores de estado. (p. 23)

Dado um espaço vetorial com dimensão finita, um *ket* $|\psi\rangle$ é representado por uma matriz coluna,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (1)$$

e possui um *bra* expresso pela matriz transposta conjugada de (1):

$$\langle\psi| = (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*), \quad (2)$$

onde o asterisco indica o complexo conjugado. O componente dual $\langle\psi|$ não é um vetor, e sim uma função linear de vetores que, ao agir em seu *ket* $|\psi\rangle$ correspondente, gera um número complexo (GRIFFITHS, 2011). Sugere-se que, para facilitar a assimilação dos conceitos, o professor utilize, inicialmente, números reais ao invés de complexos. Para exemplificar essa operação, consideremos a situação em que um estado seja dado por

$$|c\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

com c_1 e c_2 reais. O *bracket*, portanto, é o produto escalar calculado assim:

$$\langle c|c\rangle = (c_1 \quad c_2) \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 c_1 + c_2 c_2 \quad (4)$$

4.3 Princípio da superposição

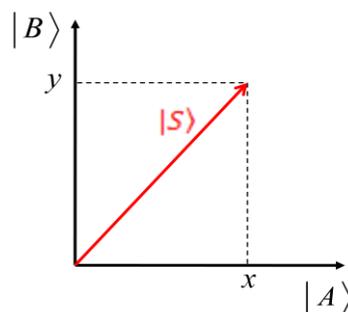
A superposição de estados é um dos princípios fundamentais da Mecânica Quântica. Schrödinger criou um experimento de pensamento que tornou-se famoso mundialmente como *paradoxo do gato*, descrito em Griffiths (2011). Nele, idealiza-se um gato dentro de uma câmara metálica dotada de uma armadilha radioativa com probabilidade 1/2 de liberar veneno e 1/2 de manter-se intacta. Caso acionada, o gato estaria morto. Mas estando a câmara fechada, como saber a condição do gato depois de um intervalo de uma hora? Para Schrödinger, até que se abra a câmara, o gato encontra-se em uma superposição de estados

(ou combinação de estados). Esse exemplo abre possibilidade para um amplo debate envolvendo diversas interpretações e novas teorias, que aqui não serão alvo de discussão, no entanto, ela é bastante similar ao processo de agitar o grão na caixinha do modelo análogo exposto no Capítulo 1 desta apostila. Enquanto o grão é agitado sobre uma tira qualquer, até que se erga a caixinha, que sua posição seja observada, ele encontra-se em uma superposição de estados. Pessoa Júnior (2003) enuncia assim, o princípio da superposição:

***Dados dois estados admissíveis de um sistema quântico,
a soma desses dois estados também é um estado admissível.***

Admitindo que um sistema quântico possua dois estados possíveis, $|A\rangle$ e $|B\rangle$, o estado desse sistema antes da realização de uma medida é a superposição dos dois estados possíveis, equivalente à combinação linear dos vetores que representam esses estados. Alcácer (2007) expressa essa situação através de um gráfico (Figura 4.1). Os estados $|A\rangle$ e $|B\rangle$ estão representados através de vetores ortogonais. O vetor de estado $|S\rangle$ é a superposição das componentes x e y de cada estado e é unitário, pois a probabilidade de que o sistema, ao ser medido, apresente-se em um dos estados é 1.

Figura 4.1. Gráfico de um sistema de dois estados possíveis, $|A\rangle$ e $|B\rangle$. Nesse sistema quântico, o estado $|S\rangle$ equivale à sobreposição dos dois estados possíveis.



Fonte: Alcácer, 2007

Portanto, de acordo com o Princípio da Superposição, o vetor de estado $|S\rangle$ é dado por

$$|S\rangle = x |A\rangle + y |B\rangle. \quad (5)$$

Os coeficientes x e y são, respectivamente, as *amplitudes de probabilidade* dos estados $|A\rangle$ e $|B\rangle$. Como pode ser visto na Figura 4.1:

$$x^2 + y^2 = 1. \quad (6)$$

A equação (6) é denominada *condição de normalização*.

4.4 Redução de estados

A Mecânica Quântica é tema de muitas discussões filosóficas devido ao caráter probabilístico das medidas obtidas acerca de uma partícula quântica. O debate sobre esse indeterminismo, permite destacar que ainda imperam controvérsias a respeito da interpretação de como a medição interfere nos resultados dos experimentos. Ao mencionar as diversas correntes interpretativas quanto à indeterminação quântica, Griffiths (2011) separa em três categorias as principais escolas de pensamento: realista, agnóstica e ortodoxa, esta última sendo ressaltada por ele como a de maior aceitação dentre a maioria dos físicos:

Por enquanto, é suficiente dizer que os experimentos confirmam decisivamente a interpretação ortodoxa: uma partícula não tem uma posição precisa antes da medida, comportando-se quase como ondas em um lago; é o processo de medida que insiste em um determinado número e, assim, de certa maneira, cria o resultado específico.
(p. 3)

Para que os estudantes possam conceber a importância da medição em Mecânica Quântica, é preciso admitir que um sistema quântico comporta-se como uma superposição de estados, portanto, não é possível prever que ele encontra-se em um estado específico. O ato de medir (ou observar) é o que o induz o sistema a se apresentar em um único estado, ou seja, a medição ocasiona a **redução de estados**. Griffiths (2011) comenta que aquilo que, de fato, representa o ato de medir é algo ainda discutível, mas para Bohr, a medição implica em proporcionar a interação entre um sistema quântico microscópico e um sistema clássico (aparelho) macroscópico. Para Heisenberg, seria um registro permanente, determinado pelo comando do observador. Na mecânica de Schrödinger, a redução de estados corresponde ao *colapso da função de onda*. Pessoa Junior (2003) expõe quatro interpretações para esse fenômeno da redução de estados:

- I. *Ondulatória* – atribui uma ideia de realidade ao estado ou à função de onda, mas sento esta realidade intermediária, uma *potencialidade* que estabelece uma probabilidade, mas que evolui no tempo como uma onda.
- II. *Corpuscular* – que pode ser chamada de *interpretação dos coletivos estatísticos* (em inglês: “ensemble interpretation”). Esta visão considera que o estado $|\psi\rangle$ é uma descrição essencialmente estatística associada a um procedimento de preparação experimental. O estado quântico, nesta visão, seria equivalente à média sobre todas as posições da partícula, versão interpretativa mais admitido a um modelo puramente corpuscular da matéria.
- III. *Dualista Realista* – admite a existência de “variáveis ocultas” na descrição de um estado quântico, este correspondendo a uma espécie de “onda piloto”, capaz de guiar as partículas.
- IV. *Complementaridade* – é a versão mais aceita dentre os físicos quanto à explicação do estado quântico. Esta interpretação, instrumentalista, considera que o estado é um mero instrumento matemático para a realização de cálculos e obtenção de previsões.

4.5 Princípio da indistinguibilidade

Na Mecânica Quântica, diferentemente da Mecânica Clássica, o conceito de trajetória não é concebido em virtude das relações de incerteza às quais uma partícula quântica está submetida. Fazendo ela parte de um sistema nanoscópico, não é possível marcá-la ou numerá-la para acompanhar seu movimento de forma contínua. Isso implica que, adotando como exemplo um sistema quântico com dois elétrons, por exemplo, se um deles for medido em determinada posição, em uma medição futura, suas coordenadas não terão nenhum valor determinado e, sendo assim, não se pode assegurar que a partícula encontrada trata-se do mesmo elétron, visto que ambos são idênticos. Conforme descreve Mahon (2013):

Na mecânica quântica não existe, por princípio, nenhuma possibilidade de seguir individualmente cada uma das partículas iguais, *i.e.*, de distingui-las. Podemos dizer que em mecânica quântica as partículas iguais perdem por completo a sua individualidade. (...) Essa característica, conhecida pelo nome de *princípio da indistinguibilidade* das partículas idênticas, desempenha um papel fundamental (...). Vamos considerar um sistema constituído por duas partículas idênticas. Devido a sua identidade, os estados do sistema que se obtêm um do outro por simples permutação de ambas as partículas devem ser completamente equivalentes do ponto de vista da física. (p. 458)

No modelo análogo, essa propriedade das partículas quânticas pode ser simulada classicamente realizando-se testes com dois grãos dentro da caixinha. Em uma tira modelo A , por exemplo, caso dois testes seguidos resultem em cada grão numa região de cor diferente da tira, torna-se difícil assegurar se os grãos permutaram suas posições ou não.

4.6 Ortonormalidade

Na seção 4.3, acerca do *Princípio da Superposição*, afirmou-se que o estado de um sistema quântico pode ser descrito como combinação linear de vários autoestados possíveis. Considere-se como exemplo o vetor $|V\rangle = \begin{pmatrix} -2 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$. É possível representá-lo como uma combinação linear $|V\rangle = a|A\rangle + b|B\rangle$ dada por:

$$|V\rangle = -2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Os vetores $|A\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ formam a base⁸ do espaço vetorial de $|V\rangle$ e, por sua vez, atendem ao que se denomina por **condições de ortonormalidade**, correspondentes a:

$$\langle A|A\rangle = \langle B|B\rangle = 1 \quad (8)$$

e

$$\langle A|B\rangle = \langle B|A\rangle = 0 \quad (9)$$

4.7 Autovalores e autovetores

Na Mecânica Quântica outro conceito abstrato é o de **observável**. Alguns autores optam por não se ater à discussão epistemológica desse termo, pois, de fato, não é algo preciso. Pessoa Júnior (2003), por exemplo, trata o observável como toda grandeza física mensurável no formalismo quântico. No entanto, Bunge (1974, p. 95), é categoricamente contrário ao termo empregado, afirmando que “Algumas propriedades matemáticas, não a *observabilidade*, constituem a diferença específica que separa os ‘observáveis’ quantomecânicos das outras variáveis dinâmicas.” Em suma, podem ser citados como exemplo de observáveis: a posição, o momento linear, a energia, a polarização do fóton, entre outros. No formalismo quântico, qualquer observável é representado por um ente matemático

⁸ Em álgebra linear, define-se por base de um espaço vetorial o conjunto de vetores linearmente independentes que geram esse espaço.

denominado **operador**, cuja ação sobre um vetor transforma-o em um vetor de mesma natureza. Utilizando-se apenas números reais, o operador corresponde a uma matriz simétrica.

A transformação gerada pela ação de um operador em um vetor é descrita matematicamente através da **equação de autovalores**, conforme cita Alcácer (2007), onde o produto entre um operador e um vetor resulta em um produto entre um autovalor e um vetor. Como exemplo de aplicação dessa equação, considere-se o operador *Hamiltoniano* (\hat{H}), que possibilita a obtenção dos autovalores de energia de um sistema quântico. Admita-se que ele seja dado, convenientemente, por $\hat{H} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$. Se λ representa os autovalores possíveis de energia, tem-se a seguinte equação de autovalores:

$$\hat{H}|S\rangle = \lambda|S\rangle, \quad (10)$$

onde $|S\rangle$ representa os **autovetores** associados. A equação (10) também pode ser escrita na forma:

$$(\hat{H} - \lambda\hat{I})|S\rangle = 0, \quad (11)$$

onde \hat{I} é a matriz identidade. O determinante da matriz $(\hat{H} - \lambda\hat{I})$ fornece a **equação característica** do operador, neste caso, dada por:

$$\begin{vmatrix} -1 - \lambda & 2 \\ 2 & 2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (12)$$

$$\lambda^2 - \lambda - 6 = 0, \quad (13)$$

de onde obtêm-se os autovalores:

$$\begin{cases} \lambda_1 = -2 \\ \lambda_2 = 3 \end{cases} \quad (14)$$

O conjunto de autovalores como os obtidos acima é chamado de **espectro**. Substituindo cada autovalor na matriz $(\hat{H} - \lambda\hat{I})$ e adotando a forma genérica $|S\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ para os autovetores, de (12) vem:

- Para $\lambda_1 = -2$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$\left. \begin{array}{l} \alpha_1 + 2\beta_1 = 0 \\ 2\alpha_1 + 4\beta_1 = 0 \end{array} \right\} \alpha_1 = -2\beta_1 \quad (16)$$

$$|S_1\rangle = \begin{pmatrix} -2\beta_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \beta_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Para se determinar β_1 , aplica-se a condição de normalização ao autovetor $|S_1\rangle$, fazendo:

$$\alpha_1^2 + \beta_1^2 = 1 \quad (18)$$

$$4\beta_1^2 + \beta_1^2 = 1 \Rightarrow \beta_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \quad (19)$$

Nota-se que em (19), β_1 deveria apresentar como soluções duas raízes reais e simétricas, no entanto, é conveniente considerar apenas a raiz positiva, pois os sinais, neste caso, representam o que matematicamente é chamado de diferença de fase, não tendo significado físico.

- Para $\lambda_2 = 3$:

$$\begin{pmatrix} -4 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$\left. \begin{array}{l} -4\alpha_2 + 2\beta_2 = 0 \\ 2\alpha_2 - \beta_2 = 0 \end{array} \right\} 2\alpha_2 = \beta_2 \quad (21)$$

$$|S_2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ 2\alpha_2 \end{pmatrix} = \alpha_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Aplicando a condição de normalização ao autovetor $|S_2\rangle$:

$$|\alpha_2|^2 + |\beta_2|^2 = 1 \quad (23)$$

$$4\beta_2^2 + \beta_2^2 = 1 \Rightarrow \beta_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}. \quad (24)$$

Os autovetores são, portanto:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (25)$$

e

$$|S_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

É possível testar a validade desses resultados através da equação de autovalores, comprovando que: **Um operador vezes um autovetor é igual a um autovalor vezes esse autovetor**. Na demonstração seguinte, aplicou-se o autovetor $|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}$ na equação (10).

$$\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} = -2 \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

O operador Hamiltoniano do exemplo anterior foi escolhido convenientemente com o propósito de demonstrar a utilização da equação de autovalores. A seguir, apresentam-se os Hamiltonianos de alguns sistemas macroscópicos do kit “*Onde Está o Grão?*”, bem como a determinação de seus autovalores e autovetores. A obtenção desses Hamiltonianos é tema de discussão do próximo tópico deste capítulo.

Sistema com 1 grão numa tira modelo A

Neste caso, o grão localiza-se à esquerda ou à direita, sobre a tira de papel. Os vetores da base serão representados, respectivamente, por $|S_E\rangle$ e $|S_D\rangle$:

$$|S_E\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{blue} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (27)$$

$$|S_D\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{blue} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

O sistema tem probabilidade $1/2$ de encontrar-se em cada um dos estados, ou seja, 50% de probabilidade para o grão na região da esquerda e 50% para o grão na região da direita. Considere-se que seu Hamiltoniano seja dado por $\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$. Esta matriz foi arbitrada, mas seguindo condições que serão apresentadas no próximo tópico. Ao agir sobre um autovetor $|S\rangle$, esse operador produz os autovalores λ . Logo, a equação de autovalores (10) permite a obtenção da equação característica:

$$\begin{vmatrix} 0 - \lambda & 2 \\ 2 & 0 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (29)$$

$$\lambda^2 - 4 = 0 \quad (30)$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = -2 \\ \lambda_2 = 2 \end{cases} \quad (31)$$

Substituindo (31) na matriz de (29), calculam-se os autovetores dados por $|S\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$:

- Para $\lambda_1 = -2$

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$2\alpha_1 + 2\beta_1 = 0 \Rightarrow \alpha_1 = -\beta_1 \quad (33)$$

$$|S_1\rangle = \begin{pmatrix} -\beta_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \beta_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

Aplicando a condição de normalização para o autovetor, obtém-se:

$$\alpha_1^2 + \beta_1^2 = 1 \Rightarrow 2\beta_1^2 = 1 \Rightarrow \beta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (35)$$

Logo, o autovetor associado a λ_1 é:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (36)$$

- Para $\lambda_2 = 2$

$$\begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (37)$$

$$\left. \begin{array}{l} -2\alpha_2 + 2\beta_2 = 0 \\ 2\alpha_2 - 2\beta_2 = 0 \end{array} \right\} \alpha_2 = \beta_2 \quad (38)$$

$$|S_2\rangle = \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \beta_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (39)$$

Aplicando a condição de normalização para o autovetor:

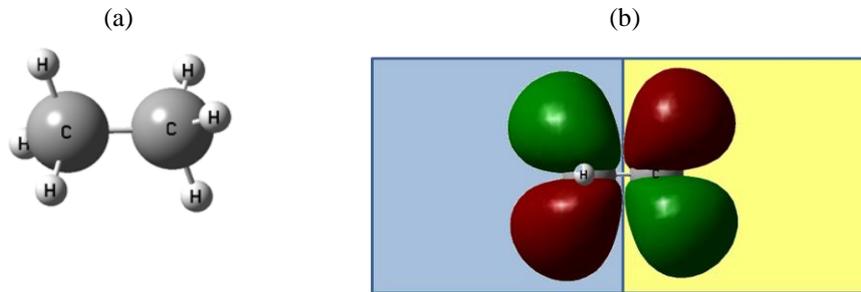
$$\alpha_2^2 + \beta_2^2 = 1 \Rightarrow 2\beta_2^2 = 1 \Rightarrow \beta_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (40)$$

O autovetor associado a λ_2 é, portanto:

$$|S_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (41)$$

O modelo análogo com 1 grão agitado sobre a tira modelo A, pode representar, por exemplo, um elétron em uma molécula de etano. As Figuras 4.2a e 4.2b, retratam, respectivamente, uma molécula de etano e o orbital ocupado em uma molécula de etano associado à tira (azul e amarela) do modelo análogo. Observa-se que a probabilidade do elétron ser localizado em qualquer um dos grupos CH_3 é a mesma.

Figura 4.2. (a) Esquema de uma molécula de etano. (b) Esquema de uma molécula de etano, com orbital molecular ocupado, associada à tira (azul e amarela) do modelo análogo.



Fonte: O Autor, 2017

Nesse modelo análogo, o menor autovalor obtido foi $\lambda_1 = -2$ e o seu estado é descrito pelo vetor $|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Nota-se que:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Lembrando que $|S_E\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|S_D\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ são os vetores da base que descrevem o grão sobre a tira, respectivamente, à esquerda e à direita, o quadrado de seus coeficientes é exatamente $\frac{1}{2}$, ou seja, o resultado da probabilidade que poderia ser obtido pela frequência relativa considerando infinitas amostras. É possível, ainda, admitir a existência de outros estados em que a probabilidade do grão ser localizado em cada uma das regiões da tira seja também $\frac{1}{2}$, como no exemplo da Figura 4.3, que, mesmo não tendo sido desenvolvido na prática, sua simetria possibilita presumir tais probabilidades. No desenho, as paredes da caixinha são incolores apenas para permitir a visualização interna.

Figura 4.3. Esboço de uma tira modelo A curvada simetricamente em suas extremidades, dentro de uma caixinha.



Fonte: O Autor, 2017

Sistema com 1 grão numa tira modelo *B*

Neste modelo de tira a região da direita (amarela) tem área duas vezes maior que a região da esquerda (azul). Logo, as probabilidades para o grão, após agitado, ser observado à esquerda ou à direita na tira serão, respectivamente, $1/3$ e $2/3$. Os vetores da base que descrevem esses estados são:

$$|S_E\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{azul} & \text{amarela} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (43)$$

$$|S_D\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{azul} & \text{amarela} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (44)$$

O operador Hamiltoniano desse sistema pode ser convenientemente escrito como $\hat{H} = \begin{pmatrix} 5 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 4 \end{pmatrix}$, que ao agir sobre um autovetor $|S\rangle$, produz os autovalores λ através da equação:

$$\hat{H} |S\rangle = \lambda |S\rangle. \quad (45)$$

Obtendo os autovalores λ a partir da equação característica:

$$\begin{vmatrix} 5 - \lambda & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 4 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (46)$$

$$\lambda^2 - 9\lambda + 18 = 0 \quad (47)$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = 3 \\ \lambda_2 = 6 \end{cases} \quad (48)$$

Substituindo (48) na matriz da equação (46), calculam-se os autovetores dados por $|S\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ fazendo:

- Para $\lambda_1 = 3$

$$\begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (49)$$

$$\left. \begin{array}{l} 2\alpha_1 - \sqrt{2} \beta_1 = 0 \\ -\sqrt{2} \alpha_1 + \beta_1 = 0 \end{array} \right\} \alpha_1 = \frac{\beta_1}{\sqrt{2}} \quad (50)$$

$$|S_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\beta_1}{\sqrt{2}} \\ \beta_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \beta_1 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (51)$$

Aplicando a condição de normalização:

$$\alpha_1^2 + \beta_1^2 = 1 \Rightarrow \frac{3\beta_1^2}{2} = 1 \Rightarrow \beta_1 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}. \quad (52)$$

Logo, o autovetor associado a λ_1 é:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (53)$$

- Para $\lambda_2 = 6$

$$\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (54)$$

$$\left. \begin{array}{l} -\alpha_2 - \sqrt{2} \beta_2 = 0 \\ -\sqrt{2} \alpha_2 - 2\beta_2 = 0 \end{array} \right\} \alpha_2 = -\sqrt{2} \beta_2 \quad (55)$$

$$|S_2\rangle = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \beta_2 \\ \beta_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \beta_2 \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (56)$$

Aplicando a condição de normalização para o autovetor:

$$\alpha_2^2 + \beta_2^2 = 1 \Rightarrow 3\beta_2^2 = 1 \Rightarrow \beta_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (57)$$

Portanto, o autovetor associado a λ_2 é:

$$|S_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (58)$$

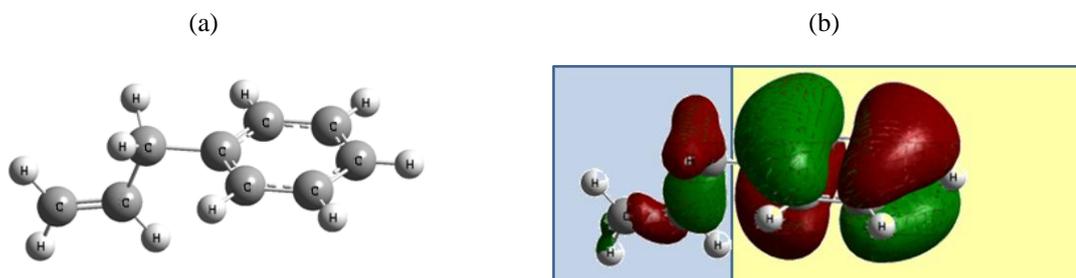
Nesta configuração, o estado de menor valor de energia, $\lambda_1 = 3$, é descrito pelo autovetor $|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$. Logo:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Lembrando que $|S_E\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|S_D\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ são os vetores da base que descrevem o grão sobre a tira, respectivamente, à esquerda e à direita, o quadrado de seus coeficientes são: 1/3 para o grão à esquerda e 2/3 para o grão à direita. Estes são os resultados das probabilidades que seriam obtidos pela frequência relativa admitindo infinitas amostras (no caso do *kit*, sorteios).

O modelo de 1 grão sobre a tira modelo *B* permite analogia, por exemplo, com a molécula de alilbenzeno. As Figuras 4.4a e 4.4b, retratam, respectivamente, uma molécula de alilbenzeno e o orbital ocupado em uma molécula de alilbenzeno associado à tira (azul e amarela) tipo *B* do modelo análogo. Observa-se a probabilidade bem maior do elétron ser localizado no grupo benzeno associado à região amarela da tira.

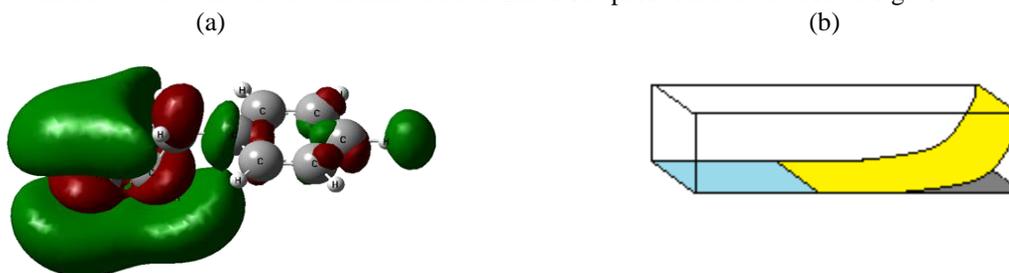
Figura 4.4. (a) Esquema de uma molécula de alilbenzeno. (b) Esquema de uma molécula de alilbenzeno, com orbital molecular ocupado, associada à tira (azul e amarela) do modelo análogo.



Fonte: O Autor, 2017

Alguma perturbação nesse sistema quântico, por exemplo, a emissão de um fóton, poderia fazer a molécula passar para um estado virtual de maior energia, como o representado na Figura 4.5a. Nota-se que nesse estado a probabilidade de encontrar o elétron na região com menos átomo de carbono (azul) é maior que na região com mais átomos de carbono (amarela). Um modelo análogo macroscópico desse estado seria, por exemplo, o da Figura 4.5b, onde uma tira modelo *B*, dentro da caixinha, tem sua extremidade amarela curvada. O modelo análogo poderia, então, corresponder ao estado $|S_2\rangle$, visto que a probabilidade de achar o grão na região azul é maior mesmo tendo ela tamanho menor. Tal fato só seria possível se o sistema fosse perturbado de alguma maneira

Figura 4.5. (a) Esquema de uma molécula de alilbenzeno em estado de maior energia, com um orbital virtual ocupado. (b) Esboço de um modelo análogo macroscópico com a região amarela da tira curvada na extremidade reduzindo sua probabilidade de conter o grão.



Fonte: O Autor, 2017

.Sistema com 1 grão numa tira modelo *C*

Nesta situação há três possibilidades de localização para o grão, o que permite estabelecer os seguintes vetores da base:

$$|S_E\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{pink} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (60)$$

$$|S_M\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{pink} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (61)$$

$$|S_D\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{pink} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (62)$$

As probabilidades para cada estado é de $1/3$ e o operador Hamiltoniano pode ser convenientemente escrito como $\hat{H} = \begin{pmatrix} 6 & -1 & -2 \\ -1 & 5 & -1 \\ -2 & -1 & 6 \end{pmatrix}$, que agindo sobre um autovetor $|S\rangle$, produz os autovalores λ :

$$\hat{H} |S\rangle = \lambda |S\rangle \quad (63)$$

Obtendo os autovalores λ a partir da equação característica:

$$\begin{vmatrix} 6 - \lambda & -1 & -2 \\ -1 & 5 - \lambda & -1 \\ -2 & -1 & 6 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (64)$$

$$-\lambda^3 + 17\lambda^2 - 90\lambda + 144 = 0 \quad (65)$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = 3 \\ \lambda_2 = 6 \\ \lambda_3 = 8 \end{cases} \quad (66)$$

Substituindo (66) na matriz de (64), calculam-se os autovetores dados por $|S\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$

fazendo:

- Para $\lambda_1 = 3$

$$\begin{pmatrix} 3 & -1 & -2 \\ -1 & 2 & -1 \\ -2 & -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \\ \gamma_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (67)$$

$$\left. \begin{array}{l} 3\alpha_1 - \beta_1 - 2\gamma_1 = 0 \\ -\alpha_1 + 2\beta_1 - \gamma_1 = 0 \\ -2\alpha_1 - \beta_1 + 3\gamma_1 = 0 \end{array} \right\} \alpha_1 = \beta_1 = \gamma_1 \quad (68)$$

$$|S_1\rangle = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_1 \\ \gamma_1 \end{pmatrix} = \gamma_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (69)$$

Aplicando a condição de normalização para o autovetor:

$$\alpha_1^2 + \beta_1^2 + \gamma_1^2 = 1 \Rightarrow 3\gamma_1^2 = 1 \Rightarrow \gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (70)$$

Portanto, o autovetor associado a λ_1 é:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (71)$$

- Para $\lambda_2 = 6$

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & -2 \\ -1 & -1 & -1 \\ -2 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \\ \gamma_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (72)$$

$$\left. \begin{array}{l} -\beta_1 - 2\gamma_1 = 0 \\ -\alpha_1 - \beta_1 - \gamma_1 = 0 \\ -2\alpha_1 - \beta_1 = 0 \end{array} \right\} \beta_1 = -2\gamma_1 \text{ e } \alpha_1 = \gamma_1 \quad (73)$$

$$|S_2\rangle = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ -2\gamma_1 \\ \gamma_1 \end{pmatrix} = \gamma_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (74)$$

Aplicando a condição de normalização para o autovetor:

$$\alpha_2^2 + \beta_2^2 + \gamma_2^2 = 1 \Rightarrow 6\gamma_2^2 = 1 \Rightarrow \gamma_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}. \quad (75)$$

Portanto, o autovetor associado a λ_2 é:

$$|S_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (76)$$

- Para $\lambda_3 = 8$

$$\begin{pmatrix} -2 & -1 & -2 \\ -1 & -3 & -1 \\ -2 & -1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_3 \\ \beta_3 \\ \gamma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (77)$$

$$\left. \begin{array}{l} -2\alpha_3 - \beta_3 - 2\gamma_3 = 0 \\ -\alpha_3 - 3\beta_3 - \gamma_3 = 0 \\ -2\alpha_3 - \beta_3 - 2\gamma_3 = 0 \end{array} \right\} \alpha_3 = -\gamma_3 \text{ e } \beta = 0 \quad (78)$$

$$|S_2\rangle = \begin{pmatrix} -\gamma_3 \\ 0 \\ \gamma_3 \end{pmatrix} = \gamma_3 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (79)$$

Aplicando a condição de normalização para o autovetor:

$$\alpha_3^2 + \beta_3^2 + \gamma_3^2 = 1 \Rightarrow 2\gamma_3^2 = 1 \Rightarrow \gamma_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (80)$$

Logo, o autovetor associado a λ_3 é:

$$|S_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (81)$$

Conforme já mencionado, $|S_E\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|S_M\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|S_D\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ são os vetores da

base que descrevem o grão sobre a tira, respectivamente, à esquerda, ao meio e à direita. O

menor valor de energia obtido foi $\lambda_1 = 3$, que corresponde ao estado descrito pelo autovetor

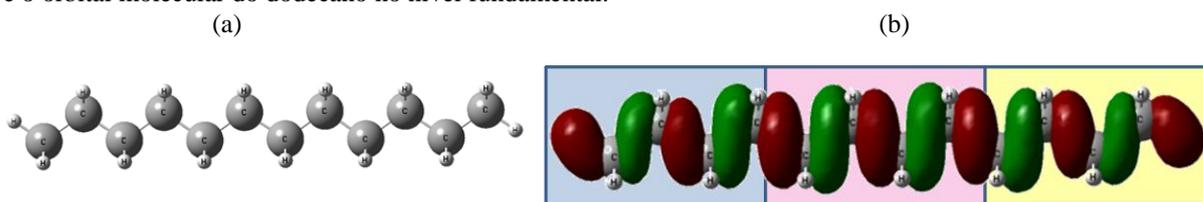
$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Observa-se que:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (82)$$

Os quadrados dos coeficientes dos vetores da base resultam, precisamente, nas probabilidades do grão se localizar em cada setor da tira, ou seja, $1/3$, resultado que poderia ser obtido através da frequência relativa com um número extremamente grande de amostras (sorteios). Esse é o estado fundamental do modelo análogo com um grão sobre uma tira modelo *C*, que pode ser comparado ao estado fundamental da molécula de dodecano. As Figuras 4.6a e 4.6b, ilustram respectivamente o esquema de uma molécula de dodecano com seu orbital no estado fundamental, onde observa-se a mesma probabilidade de um elétron ser localizado em qualquer espaço delimitado por esse orbital. Nota-se ainda a associação entre o modelo análogo da tira modelo *C*, com regiões azul, rosa e amarelo e os átomos de carbono da molécula. Os grupos das extremidades da molécula possuem um átomo de hidrogênio a mais que o grupo central, mas que não compromete essa aproximação.

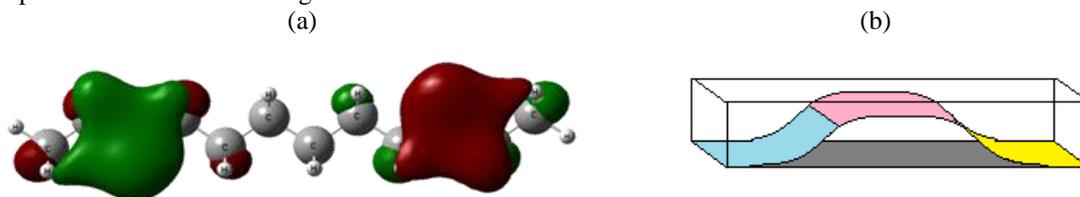
Figura 4.6. (a) Esquema de uma molécula de dodecano. (b) Associação entre o modelo análogo da tira modelo *C* e o orbital molecular do dodecano no nível fundamental.



Fonte: O Autor, 2017

É possível supor que esse sistema quântico possa ser perturbado ocasionando a passagem da molécula para um estado virtual de maior energia, de tal forma que, por exemplo, a probabilidade do elétron ser localizado entre os quatro átomos da região central da molécula seja extremamente pequena, como na Figura 4.7a. Seria possível também projetar a ideia de um modelo análogo dotado de uma tira modelo *C*, dentro da caixinha, dotada de uma elevação na região rosa, conforme a Figura 4.7b, causando maior dificuldade para a localização do grão nessa região central.

Figura 4.7. (a) Representação da molécula de dodecano sob perturbação, ocupando um orbital virtual de maior energia, onde nota-se a menor probabilidade do elétron ser localizado nos átomos mais ao centro. (b) Esboço de um modelo análogo macroscópico com elevação na região rósea da tira pressupondo menor probabilidade de conter o grão.



Fonte: O Autor, 2017

4.8 Operador Hamiltoniano (optativo)

Considera-se que o estudo básico do conteúdo desta proposta didática conclui-se na seção anterior, com a expectativa que o professor possa compreender e trabalhar junto aos estudantes as analogias, os conceitos de Mecânica Quântica e os cálculos de autovalores e autovetores. No entanto, para finalizar esta apostila, esta seção de caráter optativo, visa justificar a obtenção dos Hamiltonianos apresentados na seção anterior, bem como fornecer meios para que o professor possa obter outros Hamiltonianos e inclusive idealizar novas configurações para o modelo análogo.

Na obtenção do Hamiltoniano, é fundamental a aplicação de um operador denominado **projektor** ($\hat{\rho}$), que corresponde ao *produto externo* de um *ket* pelo seu *bra* associado, por exemplo: $|\psi\rangle\langle\psi|$. Como ponto de partida, admita-se o sistema macroscópico com um grão agitado sobre uma tira modelo *A*. No tópico anterior, este sistema foi descrito pelos vetores de estado $|S_E\rangle$ e $|S_D\rangle$, tais que:

$$|S_E\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{azul} & \text{amarelo} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (83)$$

$$|S_D\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{azul} & \text{amarelo} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (84)$$

Pela simetria dos espaços azul e amarelo da tira de papel, a probabilidade do grão localizar-se à esquerda e à direita é de $1/2$. Assim, o estado fundamental da partícula pode ser representado por $|\psi_1\rangle$ e escrito como a seguinte combinação linear:

$$|\psi_1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_E\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (85)$$

Com relação ao estado virtual, o vetor $|\psi_2\rangle$, é dado por:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_E\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (86)$$

Nota-se que a única diferença entre $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ é o sinal negativo do primeiro coeficiente de $|\psi_1\rangle$. Isso corresponde a um fator de fase diferente, que garante a ortonormalidade dos autovetores. Dito de outra forma, assegura que o produto escalar entre os vetores $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ seja nulo.

Caso o grão seja posto em $|\psi_1\rangle$, tem-se:

$$\rho = 1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 0 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & +\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (87)$$

De outra forma, se o grão for posto em $|\psi_2\rangle$, tem-se:

$$\rho = 0 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 1 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} & +\frac{1}{2} \\ +\frac{1}{2} & +\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (88)$$

As matrizes das equações (87) e (88) são denominadas **matriz densidade**. Nota-se que a soma dos elementos da diagonal principal, ou seja, o traço da matriz, é 1 em qualquer dos casos. Isso decorre do fato do sistema conter apenas 1 grão, em suma, o traço da matriz densidade é igual ao número de grãos do sistema macroscópico quando o sistema é ortonormal.

Admitindo λ_1 e λ_2 como os autovalores de energia desse sistema macroscópico, o operador Hamiltoniano será dado por:

$$\hat{H} = \lambda_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \lambda_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \begin{pmatrix} +\frac{\lambda_1}{2} & -\frac{\lambda_1}{2} \\ -\frac{\lambda_1}{2} & +\frac{\lambda_1}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} +\frac{\lambda_2}{2} & +\frac{\lambda_2}{2} \\ +\frac{\lambda_2}{2} & +\frac{\lambda_2}{2} \end{pmatrix} \quad (89)$$

Se os autovalores escolhidos forem $\lambda_1 = -2$ e $\lambda_2 = 2$, o Hamiltoniano do sistema será o primeiro fornecido na seção anterior:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (90)$$

Para uma segunda discussão, considere-se um grão agitado sobre uma tira modelo B , onde os autoestados são:

$$|S_E\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{■} & \text{■} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (91)$$

$$|S_D\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{■} & \text{■} \\ \hline \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (92)$$

Como as áreas da esquerda e da direita estão na proporção de 1:2, as probabilidades de localização do grão são, respectivamente, 1/3 e 2/3. Portanto, o estado fundamental, $|\psi_1\rangle$, é descrito por:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |S_E\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (93)$$

Admitindo-se que o sistema macroscópico seja perturbado a ponto de apresentar maior probabilidade do grão ser localizado na área menor (azul), é possível descrever este estado, $|\psi_2\rangle$, como:

$$|\psi_2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} |S_E\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (94)$$

Novamente observa-se uma diferença entre os sinais do primeiro termo de $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$, e isto é um dos fatores que garante a ortonormalidade do sistema. Assim, estando o grão no estado $|\psi_1\rangle$, a matriz densidade será dada por:

$$\rho = 1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 0 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \begin{pmatrix} +\frac{1}{3} & +\frac{\sqrt{2}}{3} \\ +\frac{\sqrt{2}}{3} & +\frac{2}{3} \end{pmatrix}, \quad (95)$$

cujo traço é 1, devido ao fato da caixinha conter apenas 1 grão. Com o grão no estado $|\psi_2\rangle$, a matriz densidade passaria a ser:

$$\rho = 0 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 1 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \begin{pmatrix} +\frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{3} \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & +\frac{1}{3} \end{pmatrix}. \quad (96)$$

Se os autovalores de energia forem dados por λ_1 e λ_2 , o Hamiltoniano do sistema será descrito por:

$$\hat{H} = \lambda_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \lambda_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \begin{pmatrix} +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\sqrt{3}\lambda_1}{2} \\ +\frac{\sqrt{3}\lambda_1}{2} & +\frac{2\lambda_1}{3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} +\frac{2\lambda_2}{3} & -\frac{\sqrt{2}\lambda_2}{3} \\ -\frac{\sqrt{2}\lambda_2}{3} & +\frac{\lambda_2}{3} \end{pmatrix} \quad (97)$$

O segundo operador Hamiltoniano fornecido na seção anterior é obtido, portanto, adotando-se os autovalores $\lambda_1 = 3$ e $\lambda_2 = 6$ para as matrizes de (97).

Concluindo a discussão acerca da obtenção dos Hamiltonianos, considera-se agora o sistema macroscópico com um grão agitado sobre uma tira modelo C , podendo ele ser localizado à esquerda, ao meio ou à direita. Os autoestados podem ser descritos por:

$$|S_E\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{pink} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \\ \end{array} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (98)$$

$$|S_M\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{pink} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \\ \bullet \\ \\ \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (99)$$

$$|S_D\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{pink} & \text{yellow} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \bullet \\ \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (100)$$

Sendo a tira dividida em áreas coloridas de mesmo tamanho e admitindo-se o estado fundamental, o grão tem probabilidade $1/3$ de, após agitado, ser encontrado em qualquer uma dessas áreas. O sistema, portanto, será descrito pelo estado $|\psi_1\rangle$, dado por:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|S_E\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|S_M\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (101)$$

A matriz densidade desse estado é descrita como:

$$\rho = 1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 0 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + 0 |\psi_3\rangle\langle\psi_3| = \begin{pmatrix} +\frac{1}{3} & +\frac{1}{3} & +\frac{1}{3} \\ +\frac{1}{3} & +\frac{1}{3} & +\frac{1}{3} \\ +\frac{1}{3} & +\frac{1}{3} & +\frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad (102)$$

Projetando a ideia de possíveis estados virtuais, admitam-se, por exemplo, dois estados, $|\psi_2\rangle$ e $|\psi_3\rangle$, advindos de perturbações no sistema, tais que o elétron não estaria mais em $|\psi_1\rangle$, mas em:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|S_E\rangle - \frac{2}{\sqrt{6}}|S_M\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (103)$$

ou, por um outro fator, em:

$$|\psi_3\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_E\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (104)$$

Esses estados virtuais, $|\psi_2\rangle$ e $|\psi_3\rangle$, podem ser comparados, respectivamente, a um sistema macroscópico com uma depressão na região do meio (Figura 4.8a) e a um sistema com uma elevação na região do meio (Figura 4.8b).

Figura 4.8. (a) Modelo análogo de um estado quântico virtual com maior probabilidade de localização da partícula na região do meio. (b) Modelo análogo de um estado virtual com baixa probabilidade de localização da partícula na região do meio.



Fonte: O Autor, 2017

As matrizes densidade dos estados $|\psi_2\rangle$ e $|\psi_3\rangle$ são, portanto:

$$\rho = 0 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 1 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + 0 |\psi_3\rangle\langle\psi_3| = \begin{pmatrix} +\frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & +\frac{1}{6} \\ -\frac{1}{3} & +\frac{4}{6} & -\frac{1}{3} \\ +\frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & +\frac{1}{6} \end{pmatrix} \quad (104)$$

$$\rho = 0 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + 0 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + 1 |\psi_3\rangle\langle\psi_3| = \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & +\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (105)$$

Assumindo λ_1 , λ_2 e λ_3 como os autovalores desse sistema macroscópico, o operador Hamiltoniano será dado por:

$$\hat{H} = \lambda_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \lambda_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \lambda_3|\psi_3\rangle\langle\psi_3| \quad (106)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\lambda_1}{3} \\ +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\lambda_1}{3} \\ +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\lambda_1}{3} & +\frac{\lambda_1}{3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} +\frac{\lambda_2}{6} & -\frac{\lambda_2}{3} & +\frac{\lambda_2}{6} \\ -\frac{\lambda_2}{3} & +\frac{4\lambda_2}{6} & -\frac{\lambda_2}{3} \\ +\frac{\lambda_2}{6} & -\frac{\lambda_2}{3} & +\frac{\lambda_2}{6} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} +\frac{\lambda_3}{2} & 0 & -\frac{\lambda_3}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\lambda_3}{2} & 0 & +\frac{\lambda_3}{2} \end{pmatrix} \quad (107)$$

Utilizando os autovalores $\lambda_1 = 3$, $\lambda_2 = 6$ e $\lambda_3 = 8$, obtém-se o Hamiltoniano proposto na seção 2.3.2.5. Esse processo de reconstrução das matrizes de \hat{H} é denominado *teorema espectral*.

Sugestões ao Professor

Os procedimentos adotados ao longo desta apostila não devem ser compreendidos como regras a serem seguidas e tampouco este produto educacional foi idealizado sob perspectiva de manter-se “engessado”. Os conteúdos aqui descritos resumem apenas um pouco do que o *kit* “Onde Está o Grão?” pode proporcionar em termos de aprendizagem ao estudante. Sugere-se que o professor interessado em levar a Mecânica Quântica para a sala de aula através desse *kit*, aprimore-o, trabalhando diferentes configurações do modelo análogo, enveredando por outros conceitos, construindo novas analogias, elaborando exercícios, inovando a forma de abordagem e buscando novas ferramentas tecnológicas. Por sinal, a matemática computacional é uma importante aliada capaz de encurtar caminhos através da praticidade na resolução de problemas. Alguns *sites* disponibilizam calculadoras de matrizes sem grandes dificuldades de manuseio. Indicações:

<https://matrixcalc.org/pt/> e <http://pt.numberempire.com/matrixcalculator.php>

REFERÊNCIAS

- ALCÁCER, L. *Introdução à química quântica computacional*. Lisboa: IST Press, 2007.
- BOLDRINI, J. L. et al. *Álgebra Linear*. 3ª Edição. São Paulo: Harper & Row do Brasil, 1980.
- BUNGE, M. *Teoria e Realidade*. Tradução: Gita. K. Guinsburg. São Paulo: Perspectiva, 1974.
- GLYNN, S. M. *Teaching science with analogies: a resource for teachers and textbooks authors*. Washington: National Reading Research Center, 1994.
- GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. Tradução: Lara Freitas. Revisão técnica: Marcelo Mulato. 2ª Edição. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- JEWETT JR., J. W.; SERWAY, R. A. *Física para cientistas e engenheiros, volume 4: luz, óptica e física moderna*. Tradução: All Tasks. Revisão técnica: Carlos R. Grandini. 8ª Edição. São Paulo: Cengage Learning, 2012.
- KNIGHT, R. *Física 4: uma abordagem estratégica*. Tradução: Clóvis Belbute Peres, Ana Rita de Avila Belbute Peres. 2ª Edição. Porto Alegre: Bookman, 2009.
- MAHON, J. R. P. *Mecânica Quântica: desenvolvimento contemporâneo com aplicações*. Rio de Janeiro: LTC, 2011.
- MEYER, P. L. *Probabilidade: Aplicações à Estatística*. Tradução: Ruy de C. B. Lourenço Filho. 2ª Edição. Rio de Janeiro: LTC, 1983.
- PESSOA JR., O. *Conceitos de Física Quântica*. 1ª Edição. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2003.
- REDAÇÃO. 78% dos Jovens Usam Smartphone, Mostra Pesquisa. Revista EXAME. 14 de outubro de 2014. Tecnologia. <<https://exame.abril.com.br/tecnologia/78-dos-jovens-usam-smartphone-mostra-pesquisa/>> Acesso em: agosto de 2017
- TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. A. *Física Moderna*. Tradução e revisão técnica: Ronaldo Sérgio de Biasi. 6ª Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2014.